

FERNANDO ZANELLA

**MODELAGEM FÍSICA DE DIODOS EM ALTA FREQUÊNCIA
USANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NO
DOMÍNIO DO TEMPO**

CURITIBA

2012

FERNANDO ZANELLA

**MODELAGEM FÍSICA DE DIODOS EM ALTA FREQUÊNCIA
USANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NO
DOMÍNIO DO TEMPO**

Dissertação apresentada como requisito parcial
à obtenção do grau de Mestre. Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Setor
de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Wilson Arnaldo
Artuzi Jr

CURITIBA

2012

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus, por me capacitar e me fornecer fé e força de vontade. Ao meu pai, mãe e irmã, meu muito obrigado pela paciência e competência ao me ensinar a trilhar meu caminho de vida com segurança e confiança. A minha noiva, por escolher em continuar sua jornada de vida ao meu lado e, por suas palavras de amparo e carinho nos momentos mais difíceis no decorrer do desenvolvimento desta dissertação.

Gostaria de agradecer também a todos os professores, que me ensinaram que a porta da sabedoria é a humildade em reconhecer erros e superar limites. Ao meu orientador, por fornecer a oportunidade da realização deste trabalho e, por compartilhar seus conhecimentos ao qual me inspiraram e ajudaram na conclusão do objetivo desta dissertação.

RESUMO

Esta dissertação sugere um modelo matemático, desenvolvido em Matlab, que utiliza o método dos elementos finitos (FEM) no domínio do tempo, que tem o objetivo de superar a dificuldade de simular simultaneamente os efeitos de baixa e alta frequência dos diodos PIN.

Nos capítulos subsequentes, é apresentado uma explicação qualitativa da física dos semicondutores fundamentada no conceito de formação de bandas de energia e de estados eletrônicos, onde conclui-se que: o fluxo dos portadores de carga é estabelecido no sentido do campo elétrico formado entre elétrons e estados eletrônicos desocupados; e a ocupação de um estado eletrônico vazio por um elétron é o que caracteriza uma recombinação.

Conceituar a dinâmica dos portadores de carga, através de formação de bandas de energia, ajuda numa melhor compreensão do processo de recombinação, porque é a recombinação que dificulta a tentativa de modelar os complicados comportamentos de baixa e alta frequência do diodo PIN.

Sendo um sistema elétrico ideal, onde a temperatura é ambiente, e os portadores de carga são consideradas como partículas semiclássicas, as equações da física do semicondutor passam a ser chamadas de equações do transporte difusivo. Para modelar satisfatoriamente os efeitos simultâneos de baixa e alta frequência do diodo PIN, as equações do transporte difusivo devem ser resolvidas simultaneamente sem simplificações, considerando a equação de Shockley, Read e Hall como uma nova equação dependente da função r .

As equações serão resolvidas em uma dimensão (variável x) e no domínio do tempo (variável t), onde o espaço e o tempo serão discretizados em elementos de comprimento Δx e de amostragem Δt . Com a aplicação do (FEM) no domínio do tempo, o resultado são equações de diferenças, tanto no espaço quanto no tempo, que serão resolvidas numericamente através do método de Newton-Raphson. Juntamente às equações resolvidas pelo método de Newton-Raphson, será incluído um circuito elétrico externo com um re-

sistor e um indutor em série, onde, o resistor é devido a fonte de alimentação, e o indutor modela as indutâncias parasitas nos terminais do diodo.

O modelo proposto por esta dissertação, quando imposto parâmetros físicos reais do silício, é numericamente estável. Desta forma, o modelo SPICE do diodo, usado em simulações eletromagnéticas que também usam o método FEM, pode ser substituído pelo simulador desenvolvido nesta dissertação.

ABSTRACT

Using the finite element method (FEM) in the time domain in the semiconductor equations, the main objective of this dissertation is to build a model, programmed in matlab, which overcomes the difficulty in modeling the transition from low to high frequency of PIN and PN diode junctions.

This work presents a qualitative explanation about the semiconductor in terms of banding power and electronic states. Addressing the transport of charge carriers, from the viewpoint of energy bands, is intended to clarify the actual limits of application of the diffusive transport, and why these equations are used to build the present model by using the finite element method in time domain. Basically, the problem is modeled in one dimension (variable x) and time domain (variable t) where space and time will be discretized in elements of length Δx and sampling Δt , respectively. Each element in space will be modeled by two linear basis functions, where the maximum of each linear function is equal to unit.

The solution of diffusive transport equations to the PN and PIN junctions, both in space and time, will be computed with the Newton-Raphson method, taking into account the equation of recombination proposed by Shockley and Read, Hall as a new function-dependent equation represented by r . It is also included, together with the discretized equations by FEM in the time domain, an external circuit with a series resistance and inductance.

The FEM simulator, developed in Matlab, with real physical parameters of silicon, is numerically stable. This motivates the future replacement of the SPICE diode model used in electromagnetic simulations, which also use the FEM method, by the developed model of PN and PIN junctions developed herein.

The proposed model in this dissertation, although overcoming the difficulty of simulating simultaneously the complicated behavior of PIN's diode low and high frequency, does not consider the breakdown effects. In the future, temperature gradients can be

considered in the continuity equations as a variable in the Newton-Raphson method, analogously to the hyperbole doping profile. For temperature time variation, a more complex model should be required as the Boltzmann transport equation.

Keywords: diffusive transport equations; finite element method; PIN and PN junctions; equation of recombination.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Ilustração da formação de bandas de energia para um potencial periódico na equação de Schroedinger resolvida pelo modelo de Kronig-Penney. . . .	8
2.2	Ilustração da formação de uma lacuna quando a energia do material é maior que a energia de Fermi.	10
2.3	Ilustração de uma barra de silício intrínseca e densidade total de cargas nula	19
3.1	Representação das funções de base para um elemento referente à equação de Poisson.	26
3.2	Representação gráfica das condições de Neumann.	28
3.3	Forma matricial para um elemento das equações (49) a(56).	30
3.4	Ilustração da concatenação em diagonal das matrizes de cada elemento que forma o espaço computacional.	31
3.5	Ilustração da aplicação da matriz incidência.	32
3.6	Circuito elétrico externo acrescentado na matriz do método de Newton-Raphson.	33
3.7	Distribuição da densidade de cargas para solução da equação de Poisson. .	34
3.8	Ilustração da Matriz Jacobiana individual, q_1 representa a equação de diferenças da equação de Poisson obtida do método de Galerkin para a primeira função de base.	36
3.9	Circuito elétrico equivalente obtido pela solução da equação diferencia simplificada da continuidade de portadores.	37
4.1	Perfil de dopagem da junção PN.	41
4.2	Perfil de dopagem da junção PIN.	41
4.3	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 1Hz.	42
4.4	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), corrente em função do potencial elétrico na junção PN.	42

4.5	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 50MHz.	43
4.6	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 100MHz.	43
4.7	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 500MHz.	44
4.8	Distribuição da densidade de Carga da junção PIN com suas respectivas capacitâncias.	45
4.9	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 10MHz.	46
4.10	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 100MHz.	46
4.11	-.-.-(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 1GHz.	47
4.12	Pulso de chaveamento com transição abrupta.	48
4.13	Comportamento simultâneo das componentes de baixa e alta frequência na corrente do circuito elétrico.	48
4.14	Resposta da corrente elétrica para junção PIN na frequência de 1GHz, sujeito ao pulso da figura 4.12.	49

LISTA DE TABELAS

2.1	Tipos de Semicondutores	9
3.1	Lista de variáveis e constantes	27
3.2	Condições de Contorno	34
4.1	Parâmetros Físicos	40
4.2	Parâmetros de discretização	44
4.3	Capacitâncias da junção PIN	45

LISTA DE SÍMBOLOS

p	Quantidade de Portadores de Carga Positiva
n	Quantidade de Portadores de Carga Negativa
ϕ	Potencial Elétrico
v_t	Potencial Térmico
N_a	Concentração de Portadores Positivos em Equilíbrio
N_D	Concentração de Portadores Negativos em Equilíbrio
ϕ_F	Potencial de Fermi
q	Carga elementar
n_i	Concentração intrínseca de Portadores de Carga
μ_p	Mobilidade de buracos
μ_n	Mobilidade de elétron
D_p	Coeficiente de Difusão de portadores positivos
D_n	Coeficiente de Difusão de portadores negativos
T	Variação espacial de Temperatura
$J_{G,r}$	Densidade de Corrente de Geração e Recombinação
ρ	Densidade Total de Cargas
r	Recombinação de portadores
τ_n	Tempo do Livre Caminho médio das Cargas Negativas
τ_p	Tempo do Livre Caminho médio das Cargas Positivas
ε	Permissividade Elétrica
N	Perfil de Dopagem
r	Recombinação
$W_k(x)$	Funções de base

φ_k	Coeficiente numérico do potencial
p_k	Coeficiente numérico de lacunas
n_k	Coeficiente numérico de elétrons
r_k	Coeficiente numérico de recombinação
N_k	Coeficiente numérico do perfil de dopagem
Δx	Comprimento dos elementos
$[A]$	Matriz global
$[X]$	Vetor de variáveis
$[\xi]$	Matriz incidência
V	Diferença de potencial na junção do diodo
V_f	Fonte de tensão do circuito externo
I	Corrente total no diodo
A	Área do diodo
d	Metade do comprimento do espaço computacional
l_p	Comprimento da camada de depleção lado P
l_n	Comprimento da camada de depleção lado N
$[f']$	Arranjo Matriz Jacobiana Individual
(K)	Passo de tempo
$[e]$	Vetor erro
$[C]$	Vetor de Constantes do passo de tempo anterior
C_j	Capacitância de depleção

SUMÁRIO

RESUMO	ii
ABSTRACT	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	viii
LISTA DE SÍMBOLOS	x
1 INTRODUÇÃO	2
1.1 Motivação e justificativa	2
1.2 Objetivos	4
1.3 Estrutura da Dissertação	5
2 REVISÃO DE CONCEITOS	7
2.1 Bandas de Energia	7
2.1.1 Semicondutores	9
2.1.2 Corrente em Semicondutores	13
2.1.2.1 Corrente de Difusão	14
2.1.2.2 Corrente de Deriva	14
2.1.2.3 Relação de Einstein	15
2.1.2.4 Geração e Recombinação	16
2.1.3 Equações do Transporte Difusivo	18
2.2 Limites do Transporte Difusivo	21
2.3 Pesquisa e Constatação	22
3 SOLUÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DIFUSIVO	25
3.1 Modelagem	25

	1
3.2 Método de Galerkin	27
3.2.1 Arranjo Matricial Individual	30
3.2.2 Arranjo Matricial Global	30
3.2.3 Matriz Incidência	31
3.3 Circuito Externo	32
3.4 Condições de Contorno	34
3.5 Condições Iniciais Estáticas	34
3.6 Matriz Jacobiana	35
3.7 Método de Newton-Raphson	36
3.8 Modelo SPICE	37
4 RESULTADOS	40
4.1 Experimentos Numéricos	40
4.1.1 Junção PN	41
4.1.2 Junção PIN	44
5 CONCLUSÕES	50
BIBLIOGRAFIA	54
APÊNDICE A	55
APÊNDICE B	59

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Motivação e justificativa

A necessidade de utilizar simuladores de circuitos elétricos é evidente para todos que trabalham com design de circuitos que operam em alta frequência. Apesar de existir a possibilidade da construção de protótipos para testes, o grau de detalhes que exige o design destes circuitos torna a construção desses protótipos uma alternativa extremamente cara devido ao alto número de amostras que pode ser exigida até conseguir resultados coerentes. Logo, é imprescindível que os simuladores de circuitos elétricos sejam capazes de representar devidamente os efeitos eletromagnéticos observados na prática com grande fidelidade.

Representar a prática através dos simuladores de circuitos elétricos só é possível devido às leis físicas, que governam o funcionamento dos componentes elétricos, terem suas equações resolvidas por modelos matemáticos. Entretanto, se a complexidade das equações for alta, estes modelos matemáticos devem ser mais rígidos, caso contrário, podem limitar a aplicação do simulador à projetos simples. Os componentes elétricos feitos com semicondutores são um exemplo, porque conforme pode ser visto em [1], possuem uma fundamentação teórica baseada no conceito de bandas de energia bem complexa, onde, a solução das equações obtidas desta teoria torna-se um problema matemático de seis dimensões ¹ que não possui solução analítica, e não é qualquer modelo matemático capaz de solucioná-las.

Dependendo das condições em que o dispositivo semicondutor é aplicado, como as condições ideais de temperatura, a teoria de bandas de energia permite considerar as equações da física do semicondutor como difusivas², reduzido o problema matemático às

¹Apêndice B: Caso comum ao resolver a equação do transporte de Boltzmann, onde, excluindo o tempo, a solução é em (x, y, z, k_x, k_y, k_z) .

²Comportamento Difusivo: A mobilidade de portadores varia linearmente com o campo elétrico.

dimensões de espaço e tempo. Porém, o fato das condições ideais de temperatura possibilitar o transporte difusivo não reduz a dificuldade de encontrar modelos matemáticos que resolvam facilmente estas equações. Este é o caso do diodo PIN quando projetado para operar em alta frequência em circuitos chaveadores ou atenuadores.

O diodo PIN é um dispositivo semicondutor que possui efeitos físicos de baixa potência e alta frequência, comumente observados em sistemas de telecomunicações, que são complicados de modelar. A forma mais eficiente de modelar estes efeitos de baixa potência e alta frequência é resolvendo as equações difusivas da física do semicondutor, que infelizmente não possui solução analítica. Desta forma, a estratégia é tentar reduzir a complexidade destas equações através da abstração matemática dos efeitos físicos observados na prática, que em muitos casos, acabam tendo soluções eficientes para aplicações específicas.

No trabalho proposto em [2] pode-se observar esta estratégia. Os efeitos de baixas e altas frequências, relatada como proveniente da recombinação de portadores [3], são tratados por um modelo matemático que aproveita características lineares, observadas na prática, que podem ser modeladas pela capacitância e a resistência do circuito elétrico equivalente do diodo PN. Desta forma, em baixa frequência, as equações utilizadas para o diodo PIN são as mesmas do circuito elétrico equivalente da junção PN. Em altas frequências, o mesmo circuito elétrico equivalente é usado, mas com os efeitos lineares da capacitância e da resistência resolvidos matematicamente através do método dos elementos finitos no domínio do tempo.

Apesar do modelo proposto apresentar coerência com os resultados obtidos na prática, e de representar satisfatoriamente os efeitos de baixa e de alta frequência do diodo PIN, este ainda não modela o comportamento simultâneo de baixas e altas frequências. O problema é que as simplificações usadas nas equações difusivas da física do semicondutor, ao qual se baseia o circuito elétrico equivalente do diodo PN, é insuficiente para modelar o fluxo de portadores do diodo PIN. Logo, tanto para o diodo PN quanto para o diodo PIN, as equações do circuito elétrico equivalente usadas em [2] ficam baseadas na equação

da corrente de Shockley³. A equação da corrente de Shockley considera a recombinação de portadores como um efeito que ocorre somente nas proximidades da camada de depleção do diodo. Para o diodo PN, esta simplificação nas equações difusivas da física do semicondutor é eficiente porque a quantidade de elementos dopantes em cada região semicondutora é muito maior que a quantidade de portadores injetados através da camada de depleção nas regiões semicondutoras.

Fisicamente, a recombinação está ligada diretamente com a quantidade de estados eletrônicos aptos a receber os portadores injetados através da camada de depleção, e consequentemente, com o tamanho das bandas proibidas de energia [4]. As bandas energéticas proibidas de uma junção PN, por serem menores devido ao processo de dopagem, possibilitam uma quantidade de estados eletrônicos aptos em receber os portadores muito maior do que numa junção PIN. Então, para o diodo PIN, os portadores injetados na região intrínseca transitam por um tempo maior até encontrar um estado eletrônico livre para se recombinar. Com isto, para um simulador ser capaz de representar simultaneamente o comportamento de baixa e alta frequência do diodo PIN, é necessário uma fundamentação teórica que considera a recombinação nas equações da física do semicondutor como um processo que ocorre em todo diodo, e não somente nas proximidades da camada de depleção.

1.2 Objetivos

O objetivo principal desta dissertação é superar a dificuldade, conforme relatada em [2], de modelar o comportamento simultâneo de baixa e alta frequência dos diodos PIN. Para que o objetivo proposto seja concretizado, as equações da física do semicondutor devem ser resolvidas simultaneamente considerando a recombinação de portadores de carga como função do espaço. Todo problema, que é contínuo no espaço e no tempo, será discretizado por elementos de comprimento Δx e, cada elemento, representado por duas funções de base lineares. As equações da física do semicondutor serão tratadas matematicamente pelo

³Para maiores informações recomenda-se a leitura do capítulo 6 do livro, Materiais e dispositivos eletrônicos de Sérgio M. Rezende.

método de Galerkin e resolvidas numericamente através do método de Newton-Raphson. Ao método numérico será acrescentado um circuito externo composto por uma fonte de tensão, resistor e um indutor, com o objetivo de modelar a resistência da fonte e as indutâncias parasitas nos terminais do diodo. Todo simulador será desenvolvido em Matlab, e será referenciado nesta dissertação como simulador FEM.

A validação do simulador FEM será com a comparação dos resultados do modelo de diodo utilizado pelo simulador de circuitos elétricos SPICE (do inglês, Simulate Program with Integrated Circuits Enphasis) através de duas estruturas em silício, uma junção PN e, uma junção PIN.

Os efeitos de baixa e alta frequência serão obtidos pelo cálculo da corrente que circula através da junção PIN, aumentando e diminuindo a frequência da fonte de alimentação do circuito externo. Para finalizar a validação do modelo, um pulso de transições abruptas em série com a fonte de tensão do circuito elétrico equivalente será aplicado com o objetivo observar os comportamentos simultâneos de baixa e alta frequência na junção PIN.

Formalizar matematicamente as equações difusivas da física do semicondutor não é o objetivo deste tema de dissertação, desta forma, serão brevemente discutidas neste trabalho. Para maiores detalhes à respeito da formalização matemática destas equações a referência [5] pode ser consultada.

1.3 Estrutura da Dissertação

Este trabalho é dividido em quatro capítulos. No segundo capítulo, encontra-se uma explicação qualitativa a respeito dos semicondutores do ponto de vista da formação de bandas de energia e de estados eletrônicos. Abordar o transporte de portadores de carga, do ponto de vista de bandas de energia, tem por objetivo esclarecer os verdadeiros limites de aplicação do transporte difusivo, e o porque usar estas equações na construção do simulador FEM.

O terceiro capítulo trata-se da modelagem e a construção do simulador FEM, partindo do princípio de que as equações de Poisson, continuidade da carga e da recombinação de portadores descrevem um problema contínuo que pode ser discretizado no espaço e

no tempo. Também neste capítulo encontra-se a aplicação do método de Galerkin e a formulação matricial usada no método numérico de Newton-Raphson.

No quarto capítulo estão os principais resultados obtidos pelo simulador FEM comparados com o modelo do diodo utilizado pelo SPICE, assim como os resultados do comportamento simultâneo de baixa e alta frequência do diodo PIN.

Na conclusão, está redigido a avaliação final dos resultados obtidos através do simulador FEM para as duas junções propostas.

Para finalizar, com o objetivo de agregar maior conhecimento à respeito da física dos semicondutores, nos apêndices encontram-se a descrição da estatística de Fermi-Dirac e a equação do transporte de Boltzmann.

CAPÍTULO 2

REVISÃO DE CONCEITOS

2.1 Bandas de Energia

A forma de equacionar um elétron dentro de uma estrutura¹ é através da solução da equação de Schroedinger, ao qual o elétron passa a ser representado pela sua energia. A solução mais simples da equação de Schroedinger é supor o elétron confinado num poço, que por analogia representa a distância entre dois átomos. A energia depende diretamente do potencial químico² substituído na equação de Schroedinger, onde, para o poço, nas "paredes", o potencial químico é considerado finito e entre os átomos o potencial é nulo. Nestas condições, a solução da equação de Schroedinger representará o elétron por estados quânticos estacionários caracterizados por níveis de energias discretos, quantizados, e confinados entre os dois átomos.

Na prática, o problema é mais complexo e só possui solução numérica porque o potencial químico da estrutura, aplicado na equação de Schroedinger, deve ser obtido da solução da equação de Poisson para uma densidade média de cargas que modela as interações entre os átomos e elétrons. Neste caso, a solução da equação de Schroedinger resulta em níveis de energia quantizados próximas umas das outras, onde cada nível de energia possui uma quantidade finita de estados eletrônicos estacionários que podem comportar um elétron. A proximidade de cada nível de energia é tão pequena que em sua totalidade formam bandas de energias contínuas. Os elétrons irão ocupar as bandas conforme sua própria energia de excitação, podendo ser esta correspondente à banda de menor energia ou a de maior energia. Quanto mais energética for a banda mais estados eletrônicos possui, e conseqüentemente, mais elétrons pode receber. Entre estas bandas de energia

¹Estrutura nesta dissertação é uma definição global de materiais isolantes, semicondutores, e condutores.

²A ligação covalente entre dois átomos formam um potencial elétrico que é denominado potencial químico

existem gaps que são regiões proibidas para os elétrons, ou seja, nenhum elétron pode estar presente nessas regiões.

O sistema de equações diferenciais formado entre a equação de Schroedinger e a equação de Poisson é sem dúvida complexo de resolver. Entretanto, a solução deste sistema de equações é fundamental para formalizar o conceito de bandas de energia, e que possibilita explicar as propriedades de diversos materiais, como por exemplo, semicondutores e o grafeno.

Na figura 2.1 está ilustrada a solução da equação de Schroedinger pelo modelo de Kronig-Penney, que conforme relatada em [1], é uma alternativa analítica para a solução da equação de Schroedinger para estruturas monocristalinas. O método de Kronig-Penney é análogo à do poço entre dois átomos relatada no primeiro parágrafo, mas com uma estrutura formada pela translação no espaço de dois em dois átomos. Desta forma, o potencial usado na equação de Schroedinger é representado por uma função periódica³, onde a solução exclui a necessidade de resolver a equação de Poisson, mas que também resulta em bandas de energia contínuas onde os máximos e mínimos são as regiões proibidas dos elétrons.

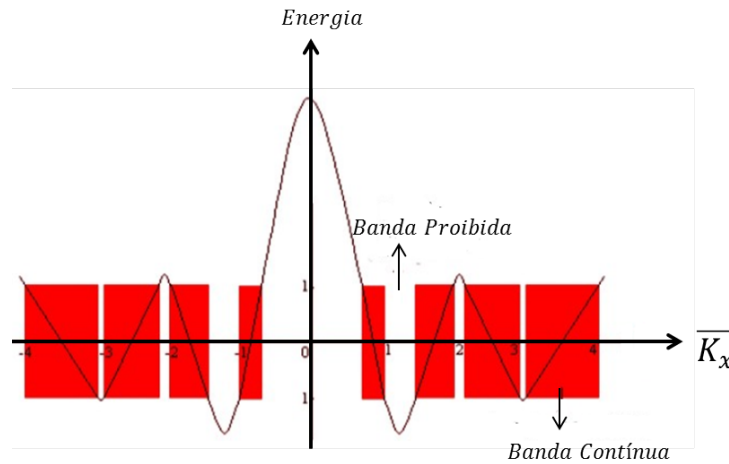


Figura 2.1: Ilustração da formação de bandas de energia para um potencial periódico na equação de Schroedinger resolvida pelo modelo de Kronig-Penney.

Em eletrônica, toda fundamentação teórica baseada no conceito de bandas de energia tem por objetivo calcular a quantidade de portadores de carga existentes em uma estru-

³Solução da equação de Schroedinger por funções de Bloch

tura. Tendo o conhecimento da quantidade de portadores, as informações de grandezas como condutividade e corrente elétrica podem ser obtidas. Porém, evidentemente, em um material existe milhares de portadores ocupando diversos estados eletrônicos que não são possíveis de serem identificados. Desta forma, o problema deve ser tratado estatisticamente pelo cálculo da probabilidade de encontrar estados eletrônicos ocupados por portadores de carga em um determinado nível de energia. O cálculo desta probabilidade é feita pela estatística de Fermi-Dirac, e depende do formato das bandas de energia provenientes da equação de Schroedinger, da temperatura e da própria energia de Fermi. Todo procedimento para o cálculo da distribuição de Fermi-Dirac, inclusive o cálculo para obter energia de Fermi, estão detalhados no apêndice A.

2.1.1 Semicondutores

O semicondutor mais conhecido para aplicação de dispositivos eletrônicos, como diodos, transistores bipolares, transistores MOS, é o silício. Porém, dependendo da aplicação, pode ser necessário que outros tipos de semicondutores sejam empregados. A tabela 2.1 lista alguns dos principais tipos usados em eletrônica. Os índices x e y representam frações estequiométricas variando de 0 a 1. Por exemplo, o composto $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$, significa que para cada 10 átomos de As tem-se 3 átomos de Al e 7 átomos de Ga .

Tabela 2.1: Tipos de Semicondutores

Classificação		Exemplos
Elementares		Si, Ge
Compostos III-V	Binários	$GaAs$
		InP
		$GaSb$
		AlP
		$AlAs$
		$AlSb$
		$InAs$
		GaN
		GaP
		$InSb$
	Ternários	$Al_xGa_{1-x}As$
		$In_xGa_{1-x}P$
		$GaAs_xP_{1-x}$
	Quaternários	$In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$
Compostos II-VI	Binários	$ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, HgS$
	Ternários	$Hg_xCd_{1-x}Te$

O silício submetido ao zero absoluto de temperatura apresenta uma característica

similar a um material isolante, ou seja, todos seus estados eletrônicos nas bandas de menor energia estão ocupados. Com o aumento da temperatura o semiconductor sofre agitação térmica, e os elétrons da banda de valência ganham energia térmica suficiente para vencer o gap da região proibida passando para a banda de condução. Na figura 2.2 está ilustrado um buraco, ou lacuna, deixada na camada de valência devido à passagem do elétron para camada de condução.

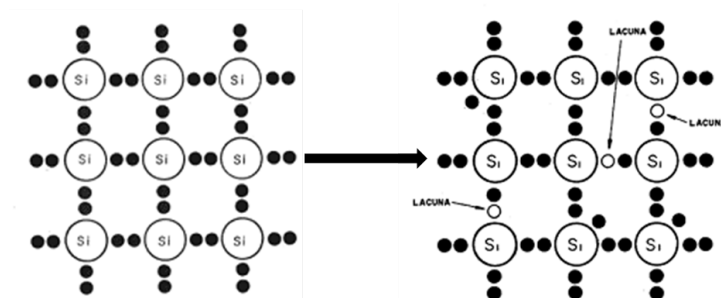


Figura 2.2: Ilustração da formação de uma lacuna quando a energia do material é maior que a energia de Fermi.

A passagem de elétrons para banda de condução é um processo dinâmico, e deixa nas bandas de menor energia, ou simplesmente, bandas de valência, portadores que se comportam como cargas elétricas positivas. Elétrons na banda de condução e os buracos na banda de valência, devido à natureza dinâmica fornecida pela temperatura ambiente no semiconductor, produzem corrente elétrica de valor médio nulo. Com a ação de um campo elétrico externo, os portadores de carga próximos a energia de Fermi (banda de valência) terão energia cinética suficiente para serem transportados para estados eletrônicos acima da energia de Fermi (banda de condução). Mas, devido ao semiconductor ainda não ser dopado, existirá gaps energéticos entre os níveis de energia na banda de condução que reduz mobilidade dos elétrons, implicando em uma corrente elétrica não maior que a dos metais mas de valor apreciável para aplicações eletrônicas.

Para tornar o silício mais apreciável em aplicações eletrônicas, é importante alterar a sua condutividade pela implantação iônica⁴ de impurezas, ou seja, por átomos diferentes dos que compõem o semiconductor puro. O objetivo principal do acréscimo de impurezas no semiconductor está na redução da energia necessária para os elétrons vencerem as re-

⁴Técnica usada na dopagem de semicondutores que supera as limitações do processo de difusão.

giões proibidas (gaps) entre as bandas de energia⁵. O decréscimo da energia necessária para vencer o gap da região proibida é evidenciada pela energia de Fermi, que consequentemente, seu valor será menor com a presença de impurezas. Dessa forma, os estados eletrônicos livres nas bandas de energia serão ocupados pelos portadores de carga mais facilmente, favorecendo o transporte de corrente elétrica e, por consequência, aumentando a condutividade do semicondutor.

O aumento exagerado dos elementos dopantes pode ter efeito contrario, os máximos e mínimos presentes na figura 2.1 podem sobrepor-se um entre si formando estados eletrônicos degenerados. Existe aplicação para semicondutores com estados de energia degenerados, mas a sua modelagem está fora do escopo desta dissertação porque exige uma diferente abordagem das equações que serão usadas. Para maiores informações sobre estados degenerados, a referência [1] pode ser consultada.

A quantidade de portadores obtida através da estatística de Fermi-Dirac para semicondutores dopados resulta nas equações

$$p = N_a e^{\frac{-\phi - \phi_F}{v_t}} \quad (1)$$

$$n = N_D e^{\frac{\phi - \phi_F}{v_t}} \quad (2)$$

As variáveis em questão são: a quantidade de portadores de carga positiva p , a quantidade de portadores de carga negativa n , o potencial elétrico ϕ e, o potencial térmico v_t . As constantes N_a e N_D são as concentrações de portadores de carga positiva e negativa quando o potencial ϕ for igual ao potencial de Fermi ϕ_F . Como a quantidade de impurezas usadas para dopar um semicondutor é alta, os valores, N_a e N_d são exatamente iguais à quantidade de impurezas. O potencial de Fermi pode ser relacionado pela energia, ou seja,

$$E_F = q\phi_F \quad (3)$$

onde q é a carga elementar.

⁵Fisicamente a redução na energia acontece porque mais bandas energéticas são acrescentadas entre os gaps.

A soma e a diferença entre os potenciais ϕ e ϕ_F nas equações (1) e (2) é o que possibilita o cálculo da corrente em semicondutores através de equações difusivas, ao qual é considerado como hipótese a concentração de portadores em regime quasi-estático [6]. Devido ao alto grau de pureza presente nos semicondutores dopados, a mobilidade dos portadores de carga nas bandas de energia pode ser considerada constante mesmo na presença do potencial externo ϕ . Porém, qualquer variação muito maior que o potencial de Fermi implicará no aquecimento do semiconductor (gradientes de temperatura) e as equações (1) e (2) não serão mais validas, e a alternativa é o cálculo da quantidade de portadores através da equação do transporte de Boltzmann que se encontra no Apêndice B.

Na ausência do potencial externo ϕ , a quantidade de portadores é conservativo (constante), de forma que o produto das equações (1) e (2) é igual a n_i , que é a concentração intrínseca ao quadrado de portadores. Este resultado é um caso específico da lei de ação das massas; vale tanto para um semiconductor puro ou dopado, calculado por,

$$pn = n_i^2. \quad (4)$$

Caso ϕ for um sinal periódico de alta frequência, e de intensidade não muito maior que a energia de Fermi, é possível através da equação (4) determinar o excesso de portadores de carga toda vez que o sinal for igual à zero.

Para finalizar esse tópico, e por questão de curiosidade, os semicondutores usados em aplicações óticas, como telas de LCD usado em televisores, a quantidade de portadores de carga que vencem o gap da banda proibida e chegam até a banda de condução não é de tão extrema importância. O que importa para estes tipos de dispositivos é o formato das bandas de energia, pois conforme prevê a teoria quântica moderna, o salto dos portares de carga entre as bandas, mas precisamente quando um elétron perde energia e retorna para a banda de valência, é seguido por uma emissão de fóton. A distância entre as bandas de energia pode alterar o comprimento de onda do fóton, alterando também a intensidade da luz emitida. A definição de portador de carga como uma partícula semi-clássica, para estes casos, perde o sentido, pois estes devem ser tratados como ondas. A probabilidade

de um elétron ocupar um estado em um nível de energia passa a ser calculado por funções de onda.

2.1.2 Corrente em Semicondutores

No início do século XX, mais precisamente na década de quarenta, só era possível obter o comportamento elétrico dos semicondutores experimentalmente. Nesse período, o mesmo grupo de pesquisadores da Bell que investigou os efeitos de junções feitas com semicondutores usou a teoria de bandas de energia, obtida pela solução da equação de Schroedinger, para equacionar o comportamento elétrico dos materiais semicondutores como um elemento integrante de circuito elétrico. Esta ideia partiu do princípio de que quando os elétrons são considerados partículas semi-clássicas, idênticas e indistinguíveis, o equilíbrio energético nestas junções é estabelecido quando a energia de Fermi, à temperatura ambiente, for igual em toda junção. Devido a esta teoria, a dinâmica de ocupação dos estados eletrônicos dentro de uma banda de energia passou a ser explicada pela variação do potencial em torno do potencial de Fermi (equação (3)).

O controle da dinâmica dos portadores de cargas elétricas nos semicondutores é feito por circuitos elétricos externos, onde o fluxo de corrente será estabelecido quando o circuito externo fornecer energia maior que a de equilíbrio térmico do semicondutor, movendo os elétrons dos estados eletrônicos do nível mais baixo de energia para outro mais alto. Os estados eletrônicos que ficaram vazios, por sua vez, na presença de energia externa, são novamente completados pela injeção de portadores, obedecendo a continuidade da carga elétrica.

Dentro do semicondutor, os portadores de cargas se deslocam para os estados eletrônicos vazios segundo quatro componentes de corrente elétrica. A primeira é a corrente de deriva devido ao campo elétrico externo aplicado; a segunda é a corrente de difusão, que é a tendência dos portadores de carga melhor se distribuírem nas bandas de energia. Adicionados ao processo de dinamismo dos portadores de carga elétrica também estão; a geração de portadores de carga, geralmente devido à incidência de luz e; a recombinação de portadores devido à ocupação dos estados eletrônicos que estão vazios. As componen-

tes de geração e recombinação, são as responsáveis por trazer o equilíbrio quando acontece a falta ou a injeção de portadores de carga dentro do semicondutor. Todas estas componentes são responsáveis pela transmissão da informação, ou simplesmente, pela corrente elétrica em semicondutores, e a este processo é atribuído o nome de corrente elétrica do transporte difusivo.

Segundo o livro (Fundamentals of carrier transport), do professor Doutor Mark Lundstrum, na realidade as quatro componentes de corrente do transporte difusivo partem das equações (1) e (2). As componentes de difusão e deriva são obtidas derivando as equações (1) e (2) em relação ao espaço, onde o resultado obtido é a variação do potencial de Fermi. A variação do potencial de Fermi fica implícito como a soma das componentes de difusão e deriva para um potencial externo aplicado. Para maiores detalhes, a referência [6] pode ser consultada.

2.1.2.1 Corrente de Difusão

O movimento de corrente de difusão é simplesmente a tendência natural dos portadores de carga se distribuírem de forma a completar uniformemente as bandas de energia, e consequentemente o espaço. Matematicamente esta componente de corrente para os portadores de cargas positivas e negativas é descrita pelas equações (5) e (6),

$$J_p^{dif} = -qD_p \nabla p \quad (5)$$

$$J_n^{dif} = -qD_n \nabla n. \quad (6)$$

Visivelmente as equações (5) e (6) descrevem um gradiente dos portadores de carga, o que significa que o fluxo de corrente é maior na direção em que existe maior quantidade de estados eletrônicos livres.

2.1.2.2 Corrente de Deriva

Quando o excesso dos portadores de carga difunde-se para uma região com mais estados eletrônicos vazios, também ocorre um desbalanceamento de carga entre essas duas regiões

que leva ao surgimento de campo elétrico. Este campo elétrico, uma vez formado, é sobreposto à corrente de difusão, e faz com que os portadores migrem com maior tendência no sentido do campo. A componente responsável por ordenar os portadores de carga é chamada corrente de deriva, descrita matematicamente pelas equações (7) e (8),

$$J_p^{der} = -q\mu_p p \nabla \phi \quad (7)$$

$$J_n^{der} = q\mu_n n \nabla \phi. \quad (8)$$

Pelo princípio da superposição, a corrente do transporte difusivo em um semiconductor é calculado pela soma das equações (5) e (6) com (7) e (8), resultando em,

$$J_p = -q\mu_p p \nabla \phi - qD_p \nabla p \quad (9)$$

$$J_n = -q\mu_n n \nabla \phi + qD_n \nabla n \quad (10)$$

onde, nas equações (9) e (10), μ_p e μ_n são respectivamente, a mobilidade do portador de carga positiva e negativa no material semiconductor.

2.1.2.3 Relação de Einstein

Conforme relatado em 2.1.1, se o potencial externo ϕ possuir energia não muito maior que potencial de Fermi a corrente no semiconductor é calculada por equações difusivas, ou seja, pelas equações (9) e (10). Nas equações (9) e (10), a mobilidade de portadores só é constante se a concentração de portadores não variar com a temperatura. Desta forma, os valores de D_p e D_n , denominados coeficientes de difusão, possuem uma relação dependente das respectivas mobilidades. Os valores de D_p e D_n podem ser determinados igualando à zero as equações (9) e (10) resultando em,

$$\mu_n n (\nabla \phi) = D_n (\nabla n) \quad (11)$$

$$\mu_p p (\nabla \phi) = -D_p (\nabla p). \quad (12)$$

Nas equações (11) e (12), e para os tópicos subsequentes, fica subentendido que o potencial ϕ já engloba o potencial externo e o potencial de Fermi. Desta forma, aplicando a equação (2) ao lado direito da equação (11) obtém-se,

$$\nabla n = \left[\left(\frac{1}{v_t} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial T} \frac{dT}{dx} \right) \vec{x} + \left(\frac{1}{v_t} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial T} \frac{dT}{dy} \right) \vec{y} + \left(\frac{1}{v_t} \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{\partial \psi}{\partial T} \frac{dT}{dz} \right) \vec{z} \right] N_D e^{\frac{\phi}{v_t} + \psi} \quad (13)$$

onde,

$$\psi \rightarrow \psi(T(x,y,z)) \quad (14)$$

é o potencial elétrico que depende da temperatura ao qual material semiconductor pode ser submetido. Por hipótese, é considerado que o potencial térmica atua como uma componente somadora ao potencial de fonte externa e de Fermi.

O potencial térmico, para uma concentração de portadores quasi-estática, deve ser constante ao longo de todo material, logo, as derivadas em função da temperatura T são nulas. Desta forma, substituindo a equação (13) sem as derivadas em função do tempo na equação (11) obtém-se,

$$\mu_n N_D e^{\frac{\phi}{v_t} - \psi} \nabla \phi = D_n \left[\left(\frac{1}{v_t} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \vec{x} + \left(\frac{1}{v_t} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \vec{y} + \left(\frac{1}{v_t} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \vec{z} \right] N_D e^{\frac{\phi}{v_t} - \psi} \quad (15)$$

$$\mu_n \nabla \phi = D_n \frac{1}{v_t} \nabla \phi. \quad (16)$$

Aplicando o mesmo procedimento para as equações (12) e (1), obtém-se a relação de Einstein dada por,

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{D_n}{\mu_n} = v_t. \quad (17)$$

O cálculo da corrente elétrica agora pode ser obtido somando as equações (9) e (10) substituindo os coeficientes de difusão pela relação (17), resultando em,

$$J_p = -q\mu_p p \nabla \phi - q\mu_p v_t \nabla p \quad (18)$$

$$J_n = -q\mu_n n \nabla \phi + q\mu_n v_t \nabla n. \quad (19)$$

2.1.2.4 Geração e Recombinação

O processo de geração e recombinação nada mais é que a taxa com que pares elétrons buracos são gerados dentro do semiconductor [7]. Do ponto de vista de bandas de energia, os buracos são os estados eletrônicos que podem ser ocupados por elétrons. Quando uma

fonte externa injeta elétrons no semicondutor, pelo transporte difusivo, o semicondutor responde "empurrando" as cargas elétricas que estão ocupando estados eletrônicos para estados vazios em regiões mais internas do semicondutor. Os estados que ficaram vazios acabam sendo novamente ocupados pelos elétrons injetados pela fonte de tensão externa. Se a taxa com que a carga elétrica injetada for igual à taxa com que os estados eletrônicos vazios são ocupados, significa que a corrente elétrica que entra no semicondutor é igual a que sai. Em contrapartida, caso a taxa de elétrons injetados seja maior do que a taxa com que os estados eletrônicos são ocupados, acontece um acúmulo de elétrons que ficam transitando dentro do semicondutor, esperando encontrar estados eletrônicos livres para serem ocupados. O tempo que os elétrons injetados têm que "esperar", para encontrar estados eletrônicos vazios, é o tempo do livre caminho médio [8] que os elétrons que ocupavam os estados eletrônicos, antes da injeção, levam para encontrarem, e ocuparem, os estados mais internos no semicondutor. Matematicamente, a fórmula usada para determinar a presença do excesso de portadores no semicondutor é dada pela lei de ação das massas dada por,

$$pn - n_i^2 = 0. \quad (20)$$

Caso a relação (20) não seja satisfeita, de imediato pode-se concluir que existe um acúmulo excessivo de cargas, e que levará um determinado tempo para que este excesso de cargas seja eliminado. Vale ressaltar que a reação do semicondutor sempre será no sentido de manter a corrente que entra sempre igual à que sai, logo, pela equação (20), conclui-se qual é o tipo de corrente, além da deriva e difusão, que esta ocorrendo. Caso a reação do semicondutor for de falta de portadores, a relação (20) será menor que zero e implicará em uma taxa de geração maior que a recombinação. Caso a relação (20) for maior do que zero, significará que a taxa de recombinação é maior que a geração de portadores.

A equação (20), com temperatura constante e homogeneia, permite mostrar se um dispositivo esta operando em baixa ou em alta frequência. A temperatura deve ser constante e, homogênea, porque qualquer variação representará numa alteração no nível de Fermi, alterando completamente a probabilidade de um estado eletrônico ser ocupado por um

elétron. As componentes de geração e de recombinação de portadores de carga, para completar os mecanismos de transporte difusivo, são adicionadas após a soma das equações (18) e (19), resultando em,

$$J = J_p + J_n + J_{G,r} \quad (21)$$

onde $J_{G,r}$ é a corrente devido aos processos de geração e recombinação.

A componente de geração de portadores está diretamente ligada à incidência de luz no semicondutor, e possui grandes aplicações como em células fotoelétricas. Incidência de luz em semicondutores, obrigatoriamente implica na consideração de uma variação de temperatura, conseqüentemente, o transporte de corrente elétrica necessita de um modelo mais abrangente como a equação do transporte de Boltzmann, pois a temperatura em uma célula fotoelétrica está em constante variação com o tempo. Caso o modelo do transporte difusivo incorpore o gradiente de temperatura, os coeficientes de difusão (Relação de Einstein) devem ser calculados por uma equação diferente da apresentada pela relação (17). Desta forma, para este tema de dissertação, a componente de geração não será incluída.

2.1.3 Equações do Transporte Difusivo

A figura 2.3, ilustra uma barra de material semicondutor à temperatura ambiente e homogênea. As quatro componentes de corrente irão atuar no transporte dos portadores de carga quando uma fonte de tensão externa for aplicada. Entre cada instante de tempo, os elétrons injetados na barra semicondutora pela fonte de tensão, irão "empurrar" os elétrons que estão próximos do ponto x para dentro da região infinitesimal de volume (região escura). A densidade de corrente elétrica de deriva, resultante do potencial elétrico formado pela diferença de cargas elétricas entre os pontos x e $x + \Delta x$, juntamente com a componente de difusão, atuam no sentido de conservar a quantidade de cargas elétricas da barra semicondutora.

Para que a quantidade de portadores seja conservativo, o fluxo de portadores de carga que entra no elemento infinitesimal de volume deve ser igual ao que sai. Assim como a

diferença entre as densidades de corrente elétrica $J(x)$ e $J(x + \Delta x)$, para cada elemento de comprimento Δx , também deve ser nula. Desta forma, se for tomado o limite matemático, onde fluxo de portadores seja equacionado por uma derivada parcial no tempo, e a razão da densidade de corrente para cada elemento Δx seja equacionando por um divergente, obtém-se a equação da continuidade de carga elétrica dada por,

$$\nabla J = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (22)$$

A densidade total de cargas ρ na equação (22) é dada por,

$$\rho = q(n - p). \quad (23)$$

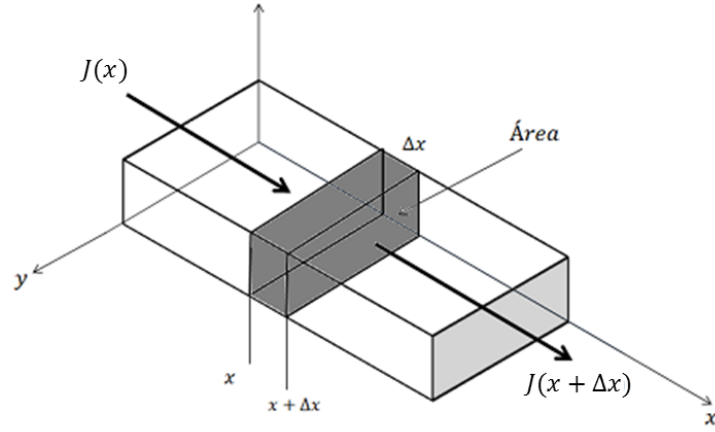


Figura 2.3: Ilustração de uma barra de silício intrínseca e densidade total de cargas nula

A importância da equação (22) é evidente pela igualdade porque permite equacionar a corrente no domínio tanto espacial quanto temporal. Logo, se a equação (22) for aplicada à equação (21), o resultado é um sistema de equações que auxilia em determinar a distribuição espacial da densidade de cargas, e o fluxo de corrente tanto estático quanto dinâmico dos semicondutores. O sistema de equações é formado por duas equações diferenciais não lineares para o fluxo de portadores de cara positivo,

$$-\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla [\mu_p (p \nabla \phi + v_t \nabla p)] - r = 0 \quad (24)$$

e negativo,

$$-\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla [\mu_n (n \nabla \phi - v_t \nabla n)] - r = 0. \quad (25)$$

Nas equações (24) e (25), a variável r é referente a taxa de recombinação dos estados eletrônicos com os elétrons dentro da região infinitesimal que também contribuem para a continuidade da carga elétrica. Em simuladores de componentes designados à rádio frequência, o processo de recombinação é crucial para a determinação da corrente elétrica [9], de forma que deve ser incorporada nas equações da continuidade, conforme feito nas equações (24) e (25). A taxa de recombinação, usada na solução das equações do transporte difusivo nesta dissertação, será calculada pelo modelo de Shockley, Read, Hall (SRH) [10], dado por

$$r = \frac{pn - n_i^2}{\tau_n(p + n_i) + \tau_p(n + n_i)} \quad (26)$$

onde τ_n , τ_p são respectivamente o tempo do livre caminho médio que os portadores levam para encontrar estados eletrônicos vazios.

A equação de SRH é interessante porque, além de ser uma função do espaço, considera a probabilidade dos estados serem ocupados entre as bandas de energia⁶. Quando um portador de carga ganha energia o suficiente para entrar em movimento, não existe como prever com certeza qual estado eletrônico dentre todas as bandas de energia do semicondutor será ocupada. Desta forma, a equação de SRH considera esse caso probabilisticamente, e o resultado é a equação (26). O processo de recombinação, entre bandas de energia, é uma característica que ocorre com maior frequência em dispositivos que são levemente dopados [10], e este é o caso de junções que não operam em tensões zener de ruptura.

Nas equações (24) e (25), devido a componente de corrente de deriva que é proveniente da diferença de cargas entre duas regiões, a função matemática que descreve o potencial elétrico precisa ser conhecida. Como a alternativa de modelar o efeito de cada portador de carga separadamente⁷ é de extrema dificuldade, o efeito de todos os portadores no semicondutor é modelado pelo potencial elétrico resultante da distribuição média da den-

⁶Este processo de recombinação pode ser encontrado na literatura como trap-assisted tunneling.

⁷A simulação de Monte Carlo considera interações entre portadores.

sidade de cargas. O potencial elétrico, para cada densidade de carga no tempo, é obtido pela equação de Poisson,

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (27)$$

onde ε é a permissividade elétrica do semicondutor, e ρ é dada pela equação (23). As equações (24), (25), (26) e, (27), modelam a eletrodinâmica do transporte difusivo não só de semicondutores, mas também de materiais condutores. Porém, para metais a equações (26) não precisa ser considerada, assim como a componente de difusão nas equações (24) e (25).

2.2 Limites do Transporte Difusivo

As equações (24) a (27) apresentam três limites importantes que influenciam drasticamente os resultados de simulações numéricas quando comparadas com experimentos. A primeira restrição está relacionada com as dimensões do material semicondutor, onde, se forem extremamente pequenas, de forma que a distância entre cada átomo do cristal é da ordem do comprimento de onda do elétron, o transporte difusivo perde seu sentido físico. A segunda restrição limita a aplicação das equações (24) a (27) para casos onde a temperatura não tem influência direta sobre o semicondutor tanto espacial como temporal. Os portadores de carga, quando estão em movimento, possuem uma energia cinética que, se for muito maior que a energia de Fermi, começará a ceder energia em forma de calor para toda estrutura semicondutora. Desta forma, a energia que os portadores recebem da fonte externa deve sempre garantir uma mobilidade constante, ou seja, uma dependência linear da velocidade com o campo elétrico. A partir do instante que os portadores de carga possuírem uma energia cinética suficiente para alterar a temperatura do cristal, a probabilidade dos estados eletrônicos serem ocupados por portadores de carga passa a variar com o tempo. Para este caso, as mobilidades das equações da continuidade da carga elétrica devem ser substituídas por equações dependentes do campo elétrico [11], ou, deve-se considerar a equação do transporte de Boltzmann.

O transporte difusivo é eficaz quando são consideradas condições ideais de aplicação, ou seja, os efeitos de variação de temperatura no tempo e no espaço são desprezados. Desta forma, a terceira limitação está relacionada as próprias equações do transporte difusivo devido a dificuldade de serem resolvidas.

2.3 Pesquisa e Constatação

As equações (24) a (27) formam um sistema de equações não lineares que não possuem solução analítica. Em muitos casos, com simplificações, os pesquisadores restringem este sistema de equações para aplicações específicas, procurando manter um equilíbrio entre o que é necessário e o que é irrelevante. As simplificações mais observadas são a independência do campo elétrico, e a abstração da recombinação de portadores de carga nas equações da continuidade (24) e (25) [12].

Em junções PN polarizadas diretamente, devido ao campo elétrico da junção ser pequeno, a componente de corrente de deriva pode ser desprezada, e a necessidade de resolver a equação de Poisson no sistema de equações (24) a (27) pode ser excluída. O cálculo da corrente elétrica, sem a necessidade de considerar o campo elétrico, passa a ser feito diretamente pela componente de difusão e de recombinação, onde, a recombinação também deve ser independente do espaço. Esta aproximação é muito aplicada em junções PN onde a polarização reversa permite considerar a junção como um circuito aberto.

A corrente de recombinação, para que seja independente do espaço, é abstraída como um pequeno excesso de portadores a mais dentro do semiconductor que leva um determinado tempo para a concentração do equilíbrio térmico da carga, nas regiões de neutralidade P e N, seja restabelecida. Esta abstração só é possível se a quantidade de elementos dopantes for maior que a quantidade de portadores minoritários injetados nas regiões P ou N [6]. Logo, a distância que todo os portadores minoritários percorrem, quando injetados, pode ser definida como não maior que o comprimento de difusão⁸.

Na ausência do campo elétrico, e abstração da recombinação, as equações da continuidade da carga elétrica tornam-se lineares e homogenias [13], de fácil solução e, de fácil

⁸Distância média que os elétrons/lacunas percorrem antes de ocorrer a recombinação.

representação por circuito elétrico equivalente [14]. Porém, nos sistemas de telecomunicações, os sinais usados são de baixa energia e de alta frequência, levantando a hipótese de que a injeção de portadores, que se torna mais rápido que o tempo de recombinação, acarreta em um acúmulo de cargas (equação (20)). Logo, a distância percorrida pelos portadores de cargas minoritários, em média, é maior que o tempo do livre caminho médio, tornando a abstração da recombinação questionável e a necessidade da representação da mesma por uma função do espaço.

No diodo PIN, em altas frequências, o problema é ainda mais crítico devido a presença da região intrínseca. Em aplicações de baixa frequência, o diodo PIN funciona de forma análoga a um diodo de junção PN, logo, a simplificação do campo elétrico e da recombinação é eficaz. Quando a frequência aumenta, os elétrons provenientes da região N se aniquilam com os portadores de carga positiva provenientes da região P. Este efeito, que leva um determinado tempo para ocorrer[15], zera completamente a carga dentro da região intrínseca. O tempo ao qual este efeito de alta frequência demora para ser observado é devido à região intrínseca, que por não ser dopada, possui gaps energéticos maiores que as encontradas nas regiões P e N, fazendo com que os portadores de cargas demorem mais tempo para se recombinarem. Em [2], os efeitos simultâneos de baixa e alta frequência não são observados devido às simplificações nas equações do transporte difusivo.

Conforme aponta [10], para uma eficiente ferramenta de simulação a equação da recombinação deve ser calculada juntamente com as equações (24) e (25). Porém, resolver a equação de SRH diretamente nas equações (24) e (25) não é uma tarefa trivial de ser comprida. Segundo [10], existem equações semi-empíricas que calculam o processo de recombinação, mas, infelizmente, estas equações acabam não sendo eficientes porque são funções que dependem da densidade de corrente, logo, só podem ser aplicadas em pós-processamento nos simuladores. O próprio trabalho proposto em [10] apresenta uma alternativa para a recombinação que pode ser aplicada às equações da continuidade, onde, para campos elétricos de baixa intensidade o modelo reduz à equação de SRH. Entretanto, este trabalho publicado contempla a recombinação como um processo isolado, onde somente é proposto um modelo de recombinação que é capaz de representar também o efeito

tunel em junções. Nenhuma forma de resolver a equação da recombinação de SHR em conjunto com as equações da continuidade e de Poisson é mencionada.

Recentemente, como pode ser visto no trabalho [16], o uso do método dos elementos finitos (FEM), vem sendo utilizado como uma eficiente ferramenta para resolver as equações da física do semiconductor. Em [17] são propostas algumas alternativas para solução das equações do transporte difusivo, porém, todas não consideram o processo de recombinação de SHR. No trabalho proposto por [18] o método dos elementos finitos é usado para resolver as equações da física do semiconductor para o diodo PIN, mas, as equações usadas consideram as simplificações do campo elétrico e da corrente de recombinação. Apesar do modelo matemático usado em [18] ser eficiente, este não é destinado à aplicações de rádio frequência.

A aplicação da equação de SHR foi encontrada no trabalho proposto por [19]. O método numérico usado na solução das equações do transporte difusivo substitui a atualização da recombinação, dado pela equação (26), nas equações da continuidade, sempre com o valor do passo de tempo anterior. Este procedimento torna o método numérico utilizado na solução das equações instável, sendo necessário um passo de tempo menor para garantir a convergência do método.

CAPÍTULO 3

SOLUÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DIFUSIVO

3.1 Modelagem

As equações do transporte difusivo serão aplicadas para duas estruturas semicondutoras, uma junção PN e uma junção PIN. As principais funções e constantes físicas usadas estão descritas na tabela 3.1. A abordagem numérica, através do método dos elementos finitos no domínio do tempo, começa alterando a equação (27) de Poisson para incluir o perfil de dopagem N das junções e as distribuições de densidades de carga p e n , resultando em

$$\nabla^2 \phi + \frac{q}{\epsilon} (p - n) = \frac{q}{\epsilon} (N). \quad (28)$$

Conforme constatado pela pesquisa desenvolvida no decorrer deste tema de dissertação, considerar a equação (26) nas equações do transporte difusivo não é uma tarefa simples a ser realizada. Até o presente momento, trabalhos recentes sobre o diodo PIN, como o proposto por [2], mencionam que ainda nenhum trabalho conseguiu incluir os efeitos simultâneos de baixa e alta frequência do diodo PIN. Como o sucesso de conseguir simular simultaneamente estas componentes de frequência depende unicamente do processo de recombinação, é proposto neste trabalho rescrever a equação (26) de SHR como uma equação dependente da função r . Este procedimento resulta na equação

$$-pn + \tau_p r n + \tau_n r p + \tau_n r n_i + \tau_p r n_i + n_i^2 = 0. \quad (29)$$

O problema, que é contínuo no espaço e no tempo, será modelado em uma dimensão (variável x), e no domínio do tempo (variável t). As incógnitas nas equações do transporte difusivo, que dependem da variável x , são respectivamente o potencial elétrico, concentração lacunas e de elétrons, e a recombinação. As incógnitas são funções desconhecidas que serão expandidas em somatórios de funções de base lineares $W_k(x)$ conforme,

$$\phi(x) = \sum \varphi_k W_k(x) \quad (30)$$

$$p(x) = \sum p_k W_k(x) \quad (31)$$

$$n(x) = \sum n_k W_k(x) \quad (32)$$

$$r(x) = \sum r_k W_k(x) \quad (33)$$

$$N(x) = \sum N_k W_k(x) \quad (34)$$

onde φ_k , p_k , n_k e r_k são os coeficientes numéricos a serem obtidos nos nós da malha de discretização espacial; N_k é o coeficiente do perfil de dopagem. Apesar do perfil de dopagem depender da variável x , seus coeficientes não são variáveis a serem obtidas na solução numérica. Cada nó tem seu respectivo valor N_k , que é constante no sistema de equações do elemento.

A figura 3.1 ilustra, para a equação de Poisson, a consequência da definição das funções de base lineares para um único elemento, ou seja,

$$\phi = \varphi_1 W_1 + \varphi_2 W_2. \quad (35)$$

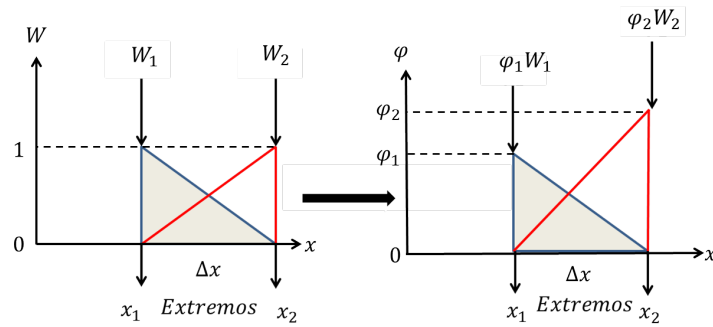


Figura 3.1: Representação das funções de base para um elemento referente à equação de Poisson.

Basicamente, esta definição consiste em dividir o problema em elementos de comprimento Δx , de forma que as funções de base dos elementos são dadas por,

$$W_1(x) = -\frac{1}{\Delta x} (x - x_2) \quad (36)$$

$$W_2(x) = -\frac{1}{\Delta x} (-x + x_1). \quad (37)$$

Quando $x = x_1$ ou $x = x_2$, a equação (35) é igual a um dos potenciais, ou seja, $\phi = \varphi_1$ ou $\phi = \varphi_2$. O mesmo procedimento deve ser aplicado para as equações (31) a (34). Esta metodologia, ilustrada pela figura 3.1, deve ser aplicada às equações do transporte difusivo em sua forma fraca.

Tabela 3.1: Lista de variáveis e constantes

Símbolo	Conteúdo
ϕ	Potencial elétrico
p	Distribuição de lacunas
n	Distribuição de elétrons
N	Perfil de dopagem
r	Recombinação
μ_p	Mobilidade de lacunas
μ_n	Mobilidade de elétrons
τ_p	Tempo de recombinação de lacunas
τ_n	Tempo de recombinação de elétrons
v_t	Potencial térmico
q	Carga elementar do elétron
ε	Permissividade elétrica

3.2 Método de Galerkin

O procedimento para obter a forma fraca das equações do transporte difusivo é obtido através do método de Galerkin. O método de Galerkin consiste em multiplicar as equações (24) e (25), (28) e (29) pelas funções de base referente a cada elemento. Após à multiplicação, as funções resultantes são integradas ao longo do elemento de comprimento $\Delta x = x_2 - x_1$. Esta metodologia modela as equações do semiconductor em sua forma fraca para um único elemento, resultando nas equações

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{d^2 \phi}{dx^2} W_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \frac{q}{\varepsilon} (p - n) W_1(x) dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{q}{\varepsilon} N(x) W_1(x) dx \quad (38)$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{d^2 \phi}{dx^2} W_2(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \frac{q}{\varepsilon} (p - n) W_2(x) dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{q}{\varepsilon} N(x) W_2(x) dx \quad (39)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} p W_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \mu_p \frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) W_1(x) dx + \dots$$

$$\dots + \int_{x_1}^{x_2} \mu_p v_t \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) W_1(x) dx - \int_{x_1}^{x_2} r W_1(x) dx = 0 \quad (40)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} p W_2(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \mu_p \frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) W_2(x) dx + \dots$$

$$\dots + \int_{x_1}^{x_2} \mu_p v_t \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) W_2(x) dx - \int_{x_1}^{x_2} r W_2(x) dx = 0 \quad (41)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} n W_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) W_1(x) dx - \dots \\
& \int_{x_1}^{x_2} \mu_n v_t \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} \right) W_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} r W_1(x) dx = 0 \quad (42) \\
& \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} n W_2(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) W_2(x) dx - \dots \\
& \dots - \int_{x_1}^{x_2} \mu_n v_t \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} \right) W_2(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} r W_2(x) dx = 0 \quad (43) \\
& - \int_{x_1}^{x_2} p n W_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \tau_p r n W_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \tau_n r p W_1(x) dx + \dots \\
& \dots + n_i \int_{x_1}^{x_2} r (\tau_n + \tau_p) W_1(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} n_i^2 W_1(x) dx = 0 \quad (44) \\
& - \int_{x_1}^{x_2} p n W_2(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \tau_p r n W_2(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \tau_n r p W_2(x) dx + \dots \\
& \dots + n_i \int_{x_1}^{x_2} r (\tau_n + \tau_p) W_2(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} n_i^2 W_2(x) dx = 0. \quad (45)
\end{aligned}$$

Com o objetivo de eliminar as derivadas de segunda ordem, nas equações (38) a (41), aplica-se o método de separação de variáveis,

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} W_j(x) dx = \frac{\partial \phi}{\partial x} W_j(x) - \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial W_j(x)}{\partial x} dx \quad (46)$$

$$\mu_p \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) W_j(x) dx = \mu_p p \frac{\partial \phi}{\partial x} W_j(x) - \mu_p \int_{x_1}^{x_2} p \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial W_j(x)}{\partial x} dx. \quad (47)$$

Para as equações (42) e (43), o método de separação de variáveis não será mostrado porque o procedimento é o mesmo.

Nas equações (46) e (47), os termos que não possuem integral são as condições de Neumann, e conforme mostra a figura 3.2, através da derivada das equações (36) e (37), seus valores são nulos em x_1 e x_2 .

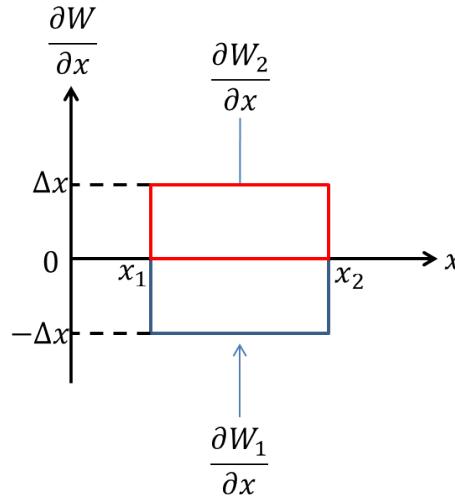


Figura 3.2: Representação gráfica das condições de Neumann.

Com as condições de Neumann definidas, cada variável deve ser substituída pela sua respectiva expansão por função de base conforme foi demonstrado na equação (35). Após todas as variáveis substituídas, basta resolver a integral para cada elemento conforme a integral,

$$\int_{x_1}^{x_2} W_1^i(x) W_2^j(x) dx = \frac{1!i!j}{(1+i+j)!} \Delta x. \quad (48)$$

Os termos que dependem das derivadas no tempo, as equações são resolvidas primeiro pelo método de Galerkin com a aplicação de suas respectivas funções de base. Após a solução do método de Galerkin, as derivadas no tempo são resolvidas pelo método da diferença finita centrada. O resultado é um sistema de equações de diferenças no tempo conforme mostra as equações,

$$-\frac{\varphi_1}{\Delta x} + \frac{\varphi_2}{\Delta x} + \frac{qp_1\Delta x}{\varepsilon^3} + \frac{qp_2\Delta x}{\varepsilon^6} - \frac{qn_1\Delta x}{\varepsilon^3} - \frac{qn_2\Delta x}{\varepsilon^6} - \frac{qN_1\Delta x}{\varepsilon^3} - \frac{qN_2\Delta x}{\varepsilon^6} \quad (49)$$

$$\frac{\varphi_1}{\Delta x} - \frac{\varphi_2}{\Delta x} + \frac{qp_1\Delta x}{\varepsilon^6} + \frac{qp_2\Delta x}{\varepsilon^3} - \frac{qn_1\Delta x}{\varepsilon^6} - \frac{qn_2\Delta x}{\varepsilon^3} - \frac{qN_1\Delta x}{\varepsilon^6} - \frac{qN_2\Delta x}{\varepsilon^3} \quad (50)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{p_1\mu_p\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{p_1\mu_p\varphi_2}{2\Delta x} - \frac{p_2\mu_p\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{p_2\mu_p\varphi_2}{2\Delta x} - p_1 \left(\frac{2\Delta x}{3\Delta t} + \frac{\mu_p v_t}{\Delta x} \right) + \dots \\ & \dots + p_2 \left(-\frac{\Delta x}{2\Delta t} + \frac{\mu_p v_t}{\Delta x} \right) - \frac{r_1\Delta x}{3} - \frac{r_2\Delta x}{6} \quad (51) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{p_1\mu_p\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{p_1\mu_p\varphi_2}{2\Delta x} - \frac{p_2\mu_p\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{p_2\mu_p\varphi_2}{2\Delta x} + p_1 \left(-\frac{\Delta x}{2\Delta t} + \frac{\mu_p v_t}{\Delta x} \right) - \dots \\ & \dots - p_2 \left(\frac{2\Delta x}{3\Delta t} + \frac{\mu_p v_t}{\Delta x} \right) - \frac{r_1\Delta x}{6} - \frac{r_2\Delta x}{3} \quad (52) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{n_1\mu_n\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{n_1\mu_n\varphi_2}{2\Delta x} - \frac{n_2\mu_n\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{n_2\mu_n\varphi_2}{2\Delta x} + n_1 \left(\frac{2\Delta x}{3\Delta t} + \frac{\mu_n v_t}{\Delta x} \right) - \dots \\ & \dots - n_2 \left(-\frac{\Delta x}{2\Delta t} - \frac{\mu_n v_t}{\Delta x} \right) + \frac{r_1\Delta x}{3} + \frac{r_2\Delta x}{6} \quad (53) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{n_1\mu_n\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{n_1\mu_n\varphi_2}{2\Delta x} - \frac{n_2\mu_n\varphi_1}{2\Delta x} + \frac{n_2\mu_n\varphi_2}{2\Delta x} - n_1 \left(-\frac{\Delta x}{2\Delta t} - \frac{\mu_n v_t}{\Delta x} \right) + \dots \\ & \dots + n_2 \left(\frac{2\Delta x}{3\Delta t} + \frac{\mu_n v_t}{\Delta x} \right) + \frac{r_1\Delta x}{6} + \frac{r_2\Delta x}{3} \quad (54) \end{aligned}$$

$$\frac{\Delta x}{12} (3p_1n_1 + p_1n_2 + p_2n_1 + p_2n_2) + \dots$$

$$\dots + \frac{\Delta x}{12} (-3\tau_p r_1 n_1 - \tau_p r_1 n_2 - \tau_p r_2 n_1 - \tau_p r_2 n_2 + 4n_i \tau_n \Delta x + 2n_i \tau_n \Delta x) + \dots$$

$$\dots + \frac{\Delta x}{12} (-3\tau_n r_1 p_1 - \tau_n r_1 p_2 - \tau_n r_2 p_1 - \tau_n r_2 p_2 + 2n_i \tau_n \Delta x + 4n_i \tau_n \Delta x) = -\frac{n_i^2 \Delta x}{2} \quad (55)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\Delta x}{12} (3p_1n_1 + p_1n_2 + p_2n_1 + p_2n_2) + \dots \\
& \dots + \frac{\Delta x}{12} (-3\tau_p r_1 n_1 - \tau_p r_1 n_2 - \tau_p r_2 n_1 - \tau_p r_2 n_2 + 4n_i \tau_n \Delta x + 2n_i \tau_n \Delta x) + \dots \\
& \dots + \frac{\Delta x}{12} (-3\tau_n r_1 p_1 - \tau_n r_1 p_2 - \tau_n r_2 p_1 - n r_2 p_2 + 2n_i \tau_n \Delta x + 4n_i \tau_n \Delta x) + \frac{n_i^2 \Delta x}{2}. \quad (56)
\end{aligned}$$

Vale ressaltar que as igualdades das equações (49) a (56) foram omitidas devido a dependência do estado de tempo anterior. Para que a igualdade seja satisfeita, todas as equações devem ser iguais a elas mesmas, mas com os valores do estado de tempo anterior, conforme a regra trapezoidal.

3.2.1 Arranjo Matricial Individual

As equações (49) a (56) representam as equações de diferenças no tempo para um elemento apenas, de forma que pode ser escrita matricialmente conforme mostra a figura 3.3.

$$[A'] = \begin{bmatrix}
-\frac{1}{\Delta x} & \frac{1}{\Delta x} & \frac{q \Delta x}{\varepsilon 3} & \frac{q \Delta x}{\varepsilon 6} & -\frac{q \Delta x}{\varepsilon 3} & -\frac{q \Delta x}{\varepsilon 6} & 0 & 0 \\
\frac{1}{\Delta x} & -\frac{1}{\Delta x} & \frac{q \Delta x}{\varepsilon 6} & \frac{q \Delta x}{\varepsilon 3} & -\frac{q \Delta x}{\varepsilon 6} & -\frac{q \Delta x}{\varepsilon 3} & 0 & 0 \\
-\frac{\mu_p}{\Delta x \cdot 2} (p_1 + p_2) & \frac{\mu_p}{\Delta x \cdot 2} p_1 + p_2 & -\frac{\mu_p v_t}{\Delta x} - \frac{2\Delta x}{3\Delta t} & \frac{\mu_p v_t}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{3\Delta t} & 0 & 0 & \frac{\Delta x}{3} & \frac{\Delta x}{6} \\
\frac{\mu_p}{\Delta x \cdot 2} (p_1 + p_2) & -\frac{\mu_p}{\Delta x \cdot 2} (p_1 + p_2) & \frac{\mu_p v_t}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{3\Delta t} & -\frac{\mu_p v_t}{\Delta x} - \frac{2\Delta x}{3\Delta t} & 0 & 0 & \frac{\Delta x}{6} & \frac{\Delta x}{3} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{bmatrix}$$

$$[X]^T = [\varphi_1 \quad \varphi_2 \quad p_1 \quad p_2 \quad n_1 \quad n_2 \quad r_1 \quad r_2]$$

Figura 3.3: Forma matricial para um elemento das equações (49) a (56).

Na figura 3.3, $[A']$ representa a matriz de constates, que devido a não linearidade das equações também é dependente das variáveis a serem encontradas. $[X]^T$ representa o vetor das variáveis a serem encontradas. A multiplicação entre a matriz $[A']$ e o vetor $[X]^T$ resulta nas equações (49) a (56).

3.2.2 Arranjo Matricial Global

O arranjo matricial individual, ilustrado na figura 3.3, possui os valores das variáveis de apenas um elemento. Para os demais elementos, é necessário um arranjo matricial que

englobe todas as variáveis em uma única matriz. Desta forma, define-se como arranjo matricial global uma matriz $[A]$ que contém, através da concatenação em diagonal, todas as matrizes de todos os arranjos individuais, conforme ilustra a figura 3.4.

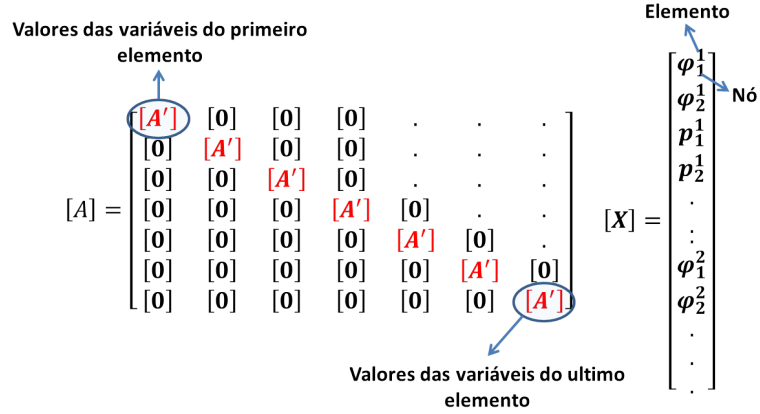


Figura 3.4: Ilustração da concatenação em diagonal das matrizes de cada elemento que forma o espaço computacional.

Na figura 3.4 também está ilustrado o vetor global $[X]$ das variáveis a serem encontradas. Neste vetor as setas apontam ao qual nó, e ao qual elemento a variável pertence.

3.2.3 Matriz Incidência

Na figura 3.4, nota-se que vetor $[X]$ apresenta nós que compartilham dois elementos. Logo, a multiplicação direta entre o vetor global $[X]$ e a matriz global $[A]$ representa uma forma não eficiente de resolver numericamente as equações da física do semiconductor. Para contornar este problema aplica-se a matriz incidência $[\xi]$, onde, ao ser multiplicada pela matriz global $[A]$, une os elementos através dos nós que tem valores iguais. A matriz incidência é composta por números 1, ao qual cada linha possui apenas um número 1. Quando um nó compartilhar dois elementos, significa que o valor da variável é o mesmo para ambos os elementos, e a coluna da matriz incidência cujo valor da variável é o mesmo receberá dois números 1. A figura 3.5 ilustra esta aplicação da matriz incidência.

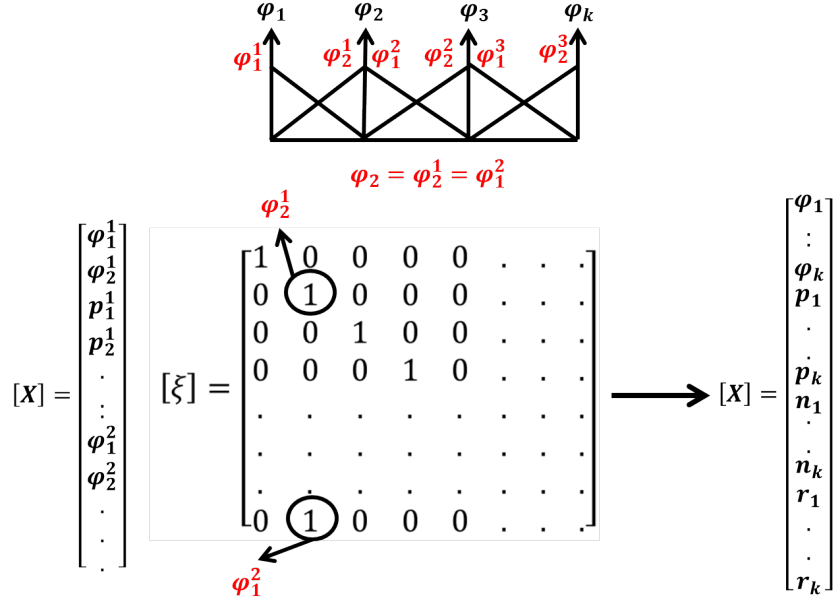


Figura 3.5: Ilustração da aplicação da matriz incidência.

A multiplicação da matriz incidência com global $[A]$, possibilita escrever o vetor de variáveis conforme aponta a seta na figura. Esta maneira de modelar o vetor $[X]$ possibilita uma implementação numérica numérica mais fácil das variáveis.

3.3 Circuito Externo

Ao modelo do diodo é acrescentado um circuito elétrico externo com uma indutância e uma resistência em série, conforme ilustra a figura 3.6. O indutor modela as indutâncias parasitas dos terminais do diodo, onde, conforme o aumento da frequência, o valor da corrente no circuito será alterada. Este circuito deve ser integrado na matriz global $[A]$ respeitando a equação da lei das malhas que resulta na equação

$$\left(\frac{2L_s}{\Delta t} + R_s\right) I^{k+1} + V^{k+1} = V_f^{k+1} + V_f^k + \left(\frac{2L_s}{\Delta t} - R_s\right) I^k - V^k. \quad (57)$$

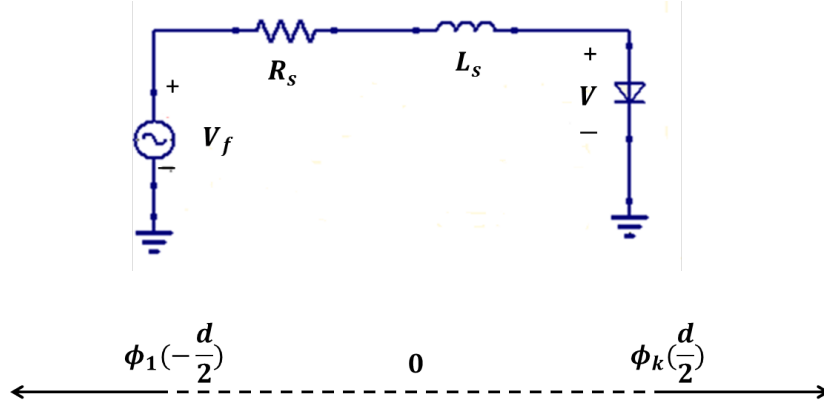


Figura 3.6: Circuito elétrico externo acrescentado na matriz do método de Newton-Raphson.

Na equação (57), a tensão V é a diferença de potencial na junção, que é calculado por,

$$V = V_0 - (\varphi_k - \varphi_1) \quad (58)$$

onde, φ_k e φ_1 são os valores dos potenciais nos nós extremos do modelo FEM. O potencial de equilíbrio térmico V_0 depende de parâmetros físicos do semiconductor, e sua equação é dada por

$$V_0 = v_t \ln\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right). \quad (59)$$

O valor da fonte é representado por V_f , e a corrente é representada por I . O cálculo da corrente elétrica que passa pelo circuito é determinada pela aplicação da equação (21) escolhendo um elemento arbitrário, e pela multiplicação da equação (21) pela área A da seção transversal da junção,

$$J_r = q \int r dv \quad (60)$$

$$J_p = -q\mu_p \left(\frac{p_j + p_{j+1}}{2} \right) \left(\frac{\varphi_{j+1} - \varphi_j}{\Delta x} \right) - q\mu_p v_t \left(\frac{p_{j+1} - p_j}{\Delta x} \right) \quad (61)$$

$$J_n = -q\mu_n \left(\frac{n_j + n_{j+1}}{2} \right) \left(\frac{\varphi_{j+1} - \varphi_j}{\Delta x} \right) + q\mu_n v_t \left(\frac{n_{j+1} - n_j}{\Delta x} \right) \quad (62)$$

$$J_r = q \left(\frac{r_j + r_{j+1}}{2} \right) \Delta x \quad (63)$$

$$I = A (J_p + J_n + J_r) \quad (64)$$

3.4 Condições de Contorno

Na tabela 3.2 estão definidas as condições de contorno de Dirichlet para o modelo FEM de uma junção de comprimento $2d$.

Tabela 3.2: Condições de Contorno

Função	$x = -d$	$x = d$
N	$-N_A$	N_D
ϕ	$\frac{-V_0 - V}{2}$	$\frac{V_0 - V}{2}$
p	N_A	$\frac{n_i^2}{N_D}$
n	$\frac{n_i^2}{N_A}$	N_D
r	0	0

3.5 Condições Iniciais Estáticas

As condições iniciais estáticas do modelo FEM é feita pela substituição na matriz global $[A]$, e no vetor das variáveis $[X]$, os valores iniciais de φ_k , p_k , n_k e r_k . Este procedimento é feito pela solução da equação de Poisson considerando somente o perfil de dopagem da junção, ou seja,

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{q}{\varepsilon} (N_a - N_d). \quad (65)$$

Na figura 3.7 está ilustrada a densidade de cargas usada na solução da equação de Poisson.

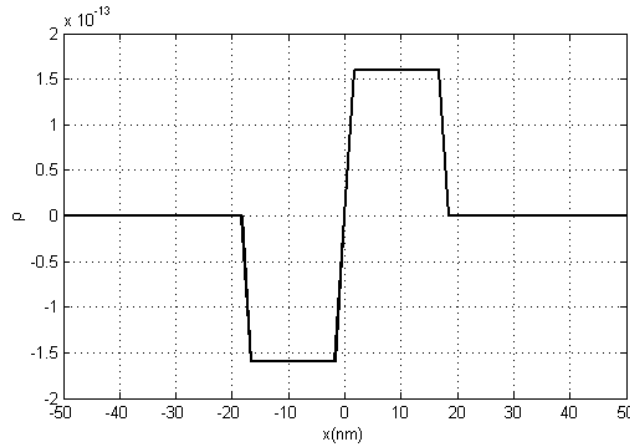


Figura 3.7: Distribuição da densidade de cargas para solução da equação de Poisson.

Resolvendo a equação (65), obtém-se o potencial elétrico em função do espaço computacional para as regiões P e N da junção, ou seja,

$$\phi_p(x) = \left[\frac{qN_A}{2\varepsilon} (-x^2 + 2xl_n - l_n^2) + \frac{V_0}{2} \right] \quad (66)$$

$$\phi_n(x) = \left[\frac{qN_D}{2\varepsilon} (x^2 + 2xl_p + l_p^2) - \frac{V_0}{2} \right] \quad (67)$$

$$\phi(x) = \phi_p(x) + \phi_n(x) \quad (68)$$

onde l_p e, l_n são os comprimentos da camada de depleção para cada região. O valor do comprimento da camada de depleção para cada região é calculado pelas formulas,

$$l_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon V_0 N_D}{q(N_A N_D + N_A^2)}} \quad (69)$$

$$l_n = \frac{N_A}{N_D} l_p \quad (70)$$

onde o potencial elétrico da camada de depleção da junção é dado por,

$$V_0 = v_t \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right). \quad (71)$$

O valor inicial das variáveis φ_k , p_k , n_k e r_k , com os φ_k dados pela equação (68), podem ser agora obtidos através da substituição da equação (68) em (1), da equação (68) em (2) e, as equações, (1) em (26) e (2) em (26).

3.6 Matriz Jacobiana

Na figura 3.8 está ilustrado o arranjo individual da matriz jacobiana $[f']$ das equações de diferenças após a aplicação do método de Galerkin. Esta matriz representa a melhor aproximação de uma função diferenciável nas vizinhanças de um ponto. A equação de diferenças, ilustrada abaixo da matriz, é a equação de Poisson obtida do método de Galerkin para a primeira função de base a ser diferenciada conforme a matriz $[f']$. Em q , os sobrescritos "linha" representam que equação obtida do método de Galerkin a ser diferenciada é referente a segunda função de base. Enquanto que os números subscritos em q (1 – 4) representam, nesta mesma ordem, as equações de Poisson, continuidade de cargas positivas, continuidade de cargas negativas e recombinação de portadores.

$$[f'] = \begin{bmatrix} \frac{\partial q_1}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_1}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_1}{\partial p_1} & \frac{\partial q_1}{\partial p_2} & \frac{\partial q_1}{\partial n_1} & \frac{\partial q_1}{\partial n_2} & \frac{\partial q_1}{\partial r_1} & \frac{\partial q_1}{\partial r_2} \\ \frac{\partial q_1'}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_1'}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_1'}{\partial p_1} & \frac{\partial q_1'}{\partial p_2} & \frac{\partial q_1'}{\partial n_1} & \frac{\partial q_1'}{\partial n_2} & \frac{\partial q_1'}{\partial r_1} & \frac{\partial q_1'}{\partial r_2} \\ \frac{\partial q_2}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_2}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_2}{\partial p_1} & \frac{\partial q_2}{\partial p_2} & \frac{\partial q_2}{\partial n_1} & \frac{\partial q_2}{\partial n_2} & \frac{\partial q_2}{\partial r_1} & \frac{\partial q_2}{\partial r_2} \\ \frac{\partial q_2'}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_2'}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_2'}{\partial p_1} & \frac{\partial q_2'}{\partial p_2} & \frac{\partial q_2'}{\partial n_1} & \frac{\partial q_2'}{\partial n_2} & \frac{\partial q_2'}{\partial r_1} & \frac{\partial q_2'}{\partial r_2} \\ \frac{\partial q_3}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_3}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_3}{\partial p_1} & \frac{\partial q_3}{\partial p_2} & \frac{\partial q_3}{\partial n_1} & \frac{\partial q_3}{\partial n_2} & \frac{\partial q_3}{\partial r_1} & \frac{\partial q_3}{\partial r_2} \\ \frac{\partial q_3'}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_3'}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_3'}{\partial p_1} & \frac{\partial q_3'}{\partial p_2} & \frac{\partial q_3'}{\partial n_1} & \frac{\partial q_3'}{\partial n_2} & \frac{\partial q_3'}{\partial r_1} & \frac{\partial q_3'}{\partial r_2} \\ \frac{\partial q_4}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_4}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_4}{\partial p_1} & \frac{\partial q_4}{\partial p_2} & \frac{\partial q_4}{\partial n_1} & \frac{\partial q_4}{\partial n_2} & \frac{\partial q_4}{\partial r_1} & \frac{\partial q_4}{\partial r_2} \\ \frac{\partial q_4'}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial q_4'}{\partial \varphi_2} & \frac{\partial q_4'}{\partial p_1} & \frac{\partial q_4'}{\partial p_2} & \frac{\partial q_4'}{\partial n_1} & \frac{\partial q_4'}{\partial n_2} & \frac{\partial q_4'}{\partial r_1} & \frac{\partial q_4'}{\partial r_2} \end{bmatrix}$$

$$q_1 = -\varphi_1 \frac{1}{\Delta x} + \varphi_2 \frac{1}{\Delta x} + \frac{q}{\varepsilon} p_1 \left(\frac{\Delta x}{3} \right) + \frac{q}{\varepsilon} p_2 \left(\frac{\Delta x}{6} \right) - \frac{q}{\varepsilon} n_1 \left(\frac{\Delta x}{3} \right) - \frac{q}{\varepsilon} n_2 \left(\frac{\Delta x}{6} \right) - \frac{q N_1 \Delta x}{3\varepsilon} - \frac{q N_2 \Delta x}{6\varepsilon}$$

Figura 3.8: Ilustração da Matriz Jacobiana individual, q_1 representa a equação de diferenças da equação de Poisson obtida do método de Galerkin para a primeira função de base.

A matriz jacobiana de arranjo individual também deve ser concatenada na diagonal conforme foi ilustrado na figura 3.4 na obtenção da matriz $[A]$ global. Após a obter a matriz jacobiana global, a matriz incidência também deve ser utilizada para unir os elementos que compartilham os mesmos nós.

3.7 Método de Newton-Raphson

A solução numérica é obtida através do método de Newton-Raphson [20] respeitando a seguinte notação,

$$\left([\xi]^T [C]^T \right)^K = \left([\xi]^T [A^*] [\xi] \right)^K [X^*]^K \quad (72)$$

$$[e] = \left([\xi]^T [A] [\xi] \right)^{K+1} [X]^{K+1} - \left([\xi]^T [C]^T \right)^K \quad (73)$$

$$[X^*]^{K+1} = [X]^{K+1} - \left([\xi]^T [f] [\xi] \right)^{-1} [e] \quad (74)$$

$$[e^*]^{K+1} = \left([\xi]^T [A^*] [\xi] \right)^{K+1} [X^*]^{K+1} - \left([\xi]^T [C]^T \right)^K \quad (75)$$

onde, os sobrescritos (K) e $(K + 1)$ representam, respectivamente, o passo de tempo anterior (valores já conhecidos) e o passo de tempo atual (valores a serem encontrados).

O procedimento numérico começa resolvendo primeiramente o caso estático, ao qual se determina o equilíbrio térmico da junção (passo de tempo $K = 0$). As equações (72) a

(75) são resolvidas iterativamente até que o vetor erro $[e]$, através da matriz jacobiana $[f]$, seja aceitável para um vetor $[C]$ nulo.

Quando o circuito externo começa a injetar portadores através de uma fonte senoidal, o potencial da junção muda devido ao cálculo na junção determinada pelo circuito externo. Desta forma, para o novo passo de tempo ($K = 1$), a equação (72) recebe os valores calculados do passo de tempo anterior ($K = 0$), e devido a nova diferença de potencial calculada pela equação do circuito externo, a matriz erro passa a ser diferente de zero. Novamente, o erro é reduzido via matriz jacobiana até um erro aceitável. O método numérico é resolvido iterativamente até o último passo de tempo, que é definido pela frequência da fonte externa.

3.8 Modelo SPICE

A simplificação das equações da física do semicondutor, mencionada no tópico 2.3, possibilita modelar um diodo de junção PN através de um circuito elétrico equivalente que esta ilustrado na figura 3.9. O diodo, como pode ser observado na figura, é modelado através de uma resistência e de uma capacitância que estão em paralelo. O indutor modela as indutâncias parasitas nos terminais do diodo, e a resistência modela a impedância de uma fonte de alimentação.

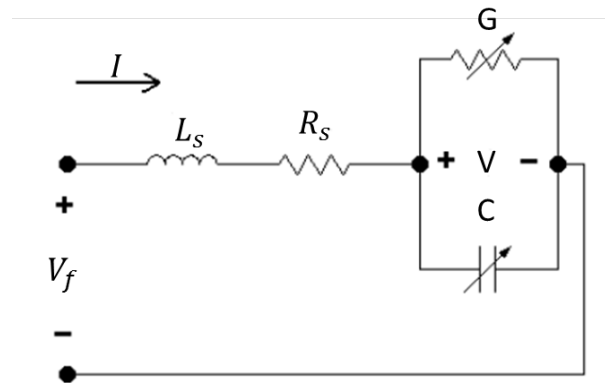


Figura 3.9: Circuito elétrico equivalente obtido pela solução da equação diferencial simplificada da continuidade de portadores.

No tópico 2.3, também foi mencionado que a corrente que circula nas regiões dopadas é devido a injeção de portadores minoritários. Então, considerando uma região N de um

diodo, ao qual uma quantidade δp de portadores de carga positiva é injetada, as simplificações mencionadas no tópico 2.3 permitem escrever o excesso de portadores injetados na região N como,

$$\delta p = \Delta p = \frac{n_i^2}{N_D} (e^{\frac{V}{V_t}} - 1) \quad (76)$$

$$-\frac{\partial \delta p}{\partial t} + D_p \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} - \frac{\delta p}{\tau_p} = 0. \quad (77)$$

Aplicando a transformada de Laplace na equação (77) resulta em,

$$D_p \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} = \left(\frac{\tau_p s + 1}{D_p \tau_p} \right) \delta p, \quad (78)$$

onde a solução desta equação diferencial é dada por,

$$\delta p = \Delta p e^{-\sqrt{\frac{(\tau_p s + 1)}{D_p \tau_p}} x}. \quad (79)$$

Descartando a dependência do potencial elétrico, o valor da densidade de corrente devido aos portadores positivos é obtido aplicando a equação (84) na equação (9) para $x = 0$. O valor da corrente é obtido pela multiplicação da densidade de corrente pela área da seção transversal.

Sendo para os portadores de carga negativa o procedimento análogo, a corrente total na junção do diodo pode ser equacionada pela soma da parcela difusiva dos portadores de carga positiva e negativa, resultando em

$$I = I_p \sqrt{\tau_p s + 1} + I_n \sqrt{\tau_n s + 1}. \quad (85)$$

A equação (85) modela os efeitos de polarização direta em uma junção PN. Como pode ser observado pela equação (85), existe componente capacitiva e resistiva na junção. As parcelas capacitivas são facilmente reconhecidas devido à dependência da frequência $s = j\omega$. Por serem obtidas da equação da densidade de corrente de difusão é atribuído a estas capacitâncias o nome capacitância de difusão. Na prática, seu efeito é observado como uma quantidade de carga residual acumulada após a transição para polarização reversa na junção. O tempo que a carga residual leva para ser descarregada depende do processo de recombinação dos portadores em cada região da junção.

A partir do momento em que a junção passa a ser polarizada reversamente, o campo elétrico passa a ser intensificado e as capacitâncias de difusão deixam de ser o efeito predominante. Através da equação (9), constata-se que a componente da densidade de corrente de difusão pode ser desprezada, e a componente de deriva atua aumentando a camada de depleção da junção. Matematicamente, o aumento da camada de depleção é modelada através da equação de Poisson, onde, pequenas variações em torno do potencial de Fermi resultam em pequenas variação no comprimento da camada de depleção.

Definindo a equação

$$L = l_n + l_p \quad (87)$$

como o comprimento total da camada de depleção, por hipótese pode-se dizer que devido ao acúmulo de cargas na polarização reversa, existe uma capacitância C_j , denominada capacitância de depleção que varia conforme o comprimento da camada de depleção. Esta capacitância pode ser calculada conforme a equação

$$C_j = \frac{dQ}{dL} \frac{dL}{d\phi} \quad (88)$$

onde Q é a carga total na junção PN.

Resolvendo a equação (88), o valor da capacitância de depleção C_j é dado por,

$$C_j = A \sqrt{\frac{q\epsilon}{2(V-V_0)}} \left(\frac{N_A N_D}{N_A + N_D} \right). \quad (89)$$

A corrente devida a alimentação reversa da junção é denominada corrente de depleção, e sua equação é obtida através da definição da corrente em capacitores, onde, o valor da capacitância é definida pela integral da equação (89) em função do potencial da junção. Desta forma, o modelo SPICE é definido pela soma das correntes de difusão e depleção conforme mostra a equação

$$I = I_p \sqrt{\tau_p s + 1} + I_n \sqrt{\tau_n s + 1} + s \int C_j dV. \quad (85)$$

Para aplicações computacionais, a equação (85) apresenta complicações devido aos termos que estão dentro da raiz. Logo, as componentes da corrente de difusão da equação (85) são aproximadas por série de Taylor, resultando em,

$$I \approx I_p \left(\frac{\tau_p s}{2} + 1 \right) + I_n \left(\frac{\tau_n s}{2} + 1 \right) + s \int C_j dV. \quad (86)$$

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

4.1 Experimentos Numéricos

Com o objetivo de compreender o correto funcionamento do método proposto, foram adotadas duas estruturas, uma junção PN e, uma junção PIN, ambas em silício. A junção PN é modelada por uma tangente hiperbólica conforme mostra figura 4.1, e a junção PIN, é modelada por uma transição abrupta conforme ilustra figura 4.2. Os parâmetros físicos, e em quais condições estes foram usados nas simulações, encontram-se listados na tabela 4.1. Os valores da tabela foram obtidos com o auxílio da calculadora¹, que através de curvas determinadas empiricamente, fornece os valores das constantes dos semicondutores.

Tabela 4.1: Parâmetros Físicos

Parâmetros	Valor	Condição
μ_p	$414,8 \frac{cm^2}{Vs}$	$N_A = 10^{15} cm^{-3}$
μ_n	$1169 \frac{cm^2}{Vs}$	$N_D = 10^{16} cm^{-3}$
τ_p	$100 \mu s$	$N_A = 10^{15} cm^{-3}$
τ_n	$90,64 \mu s$	$N_D = 10^{16} cm^{-3}$
ε	$11,8 \varepsilon_0$	—
d	$6 \mu m$	—
A	$5 (10^4) \mu m^2$	—
n_i	$1,5 (10^{10}) cm^{-3}$	$T = 300 K$
V_0	0,618	$T = 300 K$
v_t	0,025	$T = 300 K$
q	$1,6 (10^{-19}) C$	—

¹PVLighHouse: Disponibilizado na internet no endereço <http://www.pvlighthouse.com.au>

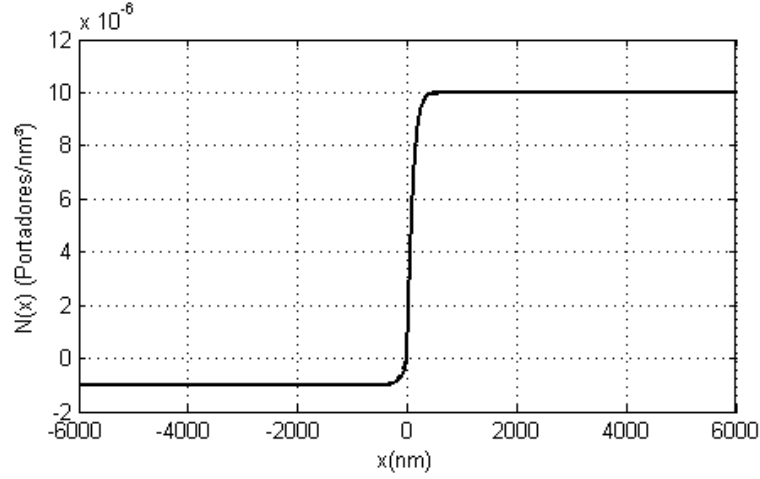


Figura 4.1: Perfil de dopagem da junção PN.

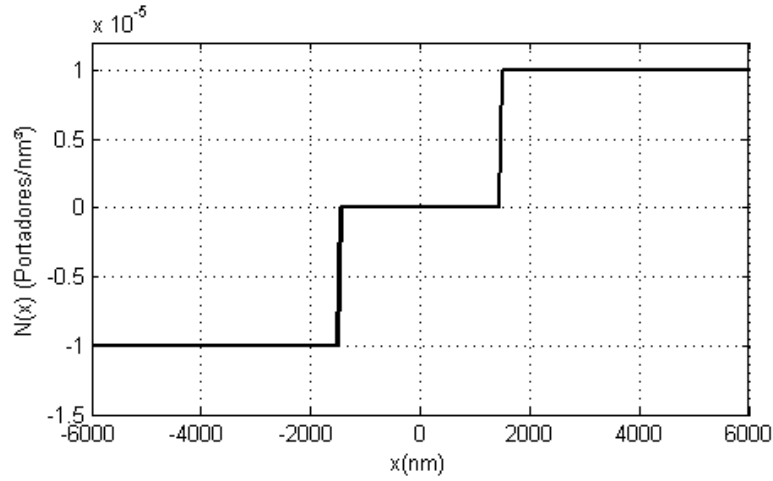


Figura 4.2: Perfil de dopagem da junção PIN.

4.1.1 Junção PN

Para a junção PN foram realizados quatro simulações, onde a primeira representa a curva da corrente em função do potencial na junção do diodo. A curva da corrente em função do potencial foi obtida aplicando um sinal senoidal com 5 volts de pico, com uma frequência de $1Hz$. Através do circuito externo, obteve-se a corrente e o potencial na junção para cada passo de tempo, e com estes dados, foi possível obter a curva da corrente em função do potencial. Para o cálculo da capacitância de depleção e corrente de saturação, do modelo SPICE, foram aplicadas as equações,

$$\lim_{V \rightarrow 0} C_j = A \sqrt{\frac{q\epsilon}{2(V_0)} \left(\frac{N_A N_D}{N_A + N_D} \right)} \quad (80)$$

$$I_s = \frac{Aqn_i^2}{N_D} \sqrt{\frac{\mu_p}{\tau_p} v_t} + \frac{Aqn_i^2}{N_A} \sqrt{\frac{\mu_n}{\tau_n} v_t}. \quad (81)$$

Nas figuras 4.3 e 4.4 estão representadas, respectivamente, a corrente em função do tempo comparada com o modelo SPICE, e a curva da corrente em função do potencial em escala logarítmica, também comparada com o modelo SPICE.

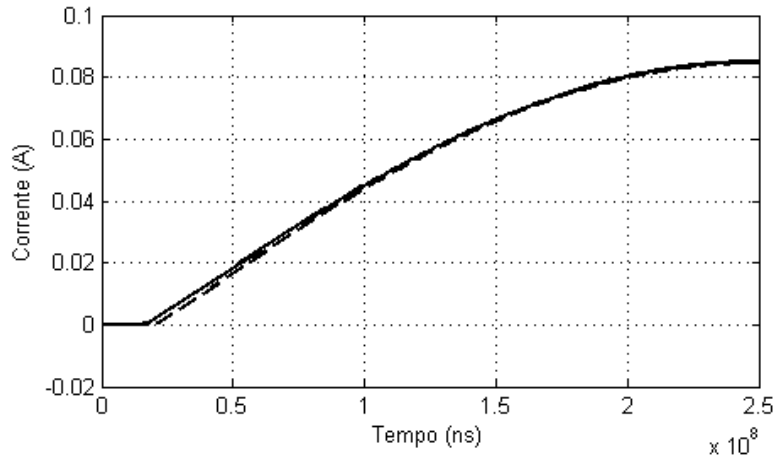


Figura 4.3: -.-.-.(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 1Hz.

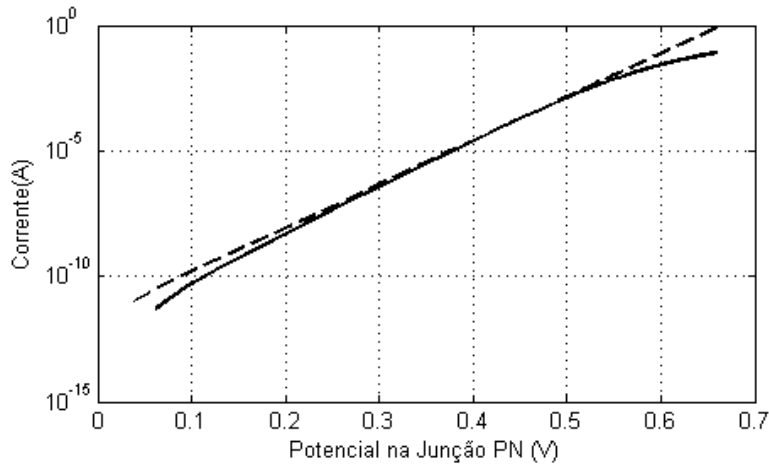


Figura 4.4: -.-.-.(SPICE) -(modelo Proposto), corrente em função do potencial elétrico na junção PN.

Os gráficos das figuras 4.5, figura 4.6 e figura 4.7 mostram os resultados obtidos com o simulador FEM comparando-os com os resultados simulados do modelo SPICE para três frequências distintas. A tensão aplicada pela fonte de sinal é senoidal com 5 volts de pico. O valor do parâmetro tempo de transição, do modelo SPICE, foi estimado igualando as respostas do simulador FEM e do modelo SPICE para a menor frequência,

resultando em $t_t = 1,5ns$. Os valores da capacitância de depleção e corrente de saturação foram obtidos da simulação estática (baixa frequência), e os demais parâmetros do modelo SPICE foram atribuídos os valores correspondentes à junção PN ideal. A semelhança entre ambos os modelos nas três frequências é devido à quantidade elevada de elementos dopantes nas regiões P e N. A recombinação de portadores injetados ocorre prontamente e próxima à camada de depleção em ambas as regiões. Neste caso, o cálculo da da corrente de recombinação pode ser modelado pela capacitância de difusão do modelo SPICE, e os resultados obtidos serão semelhantes aos observados na prática. As diferenças em amplitude no gráfico 4.7 se da devido a solução simultânea das componentes de corrente de deriva e difusão no modelo FEM.

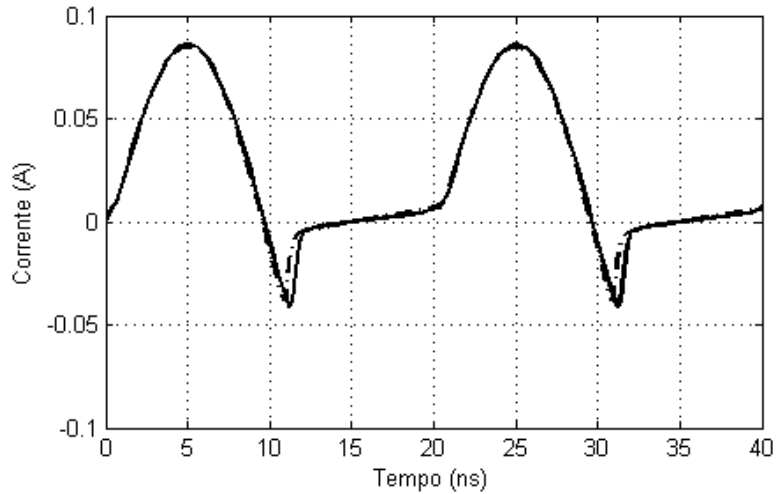


Figura 4.5: ---.(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 50MHz.

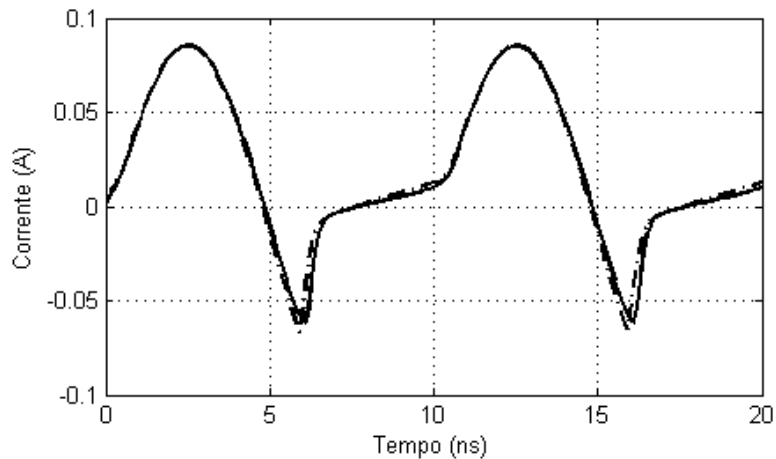


Figura 4.6: ---.(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 100MHz.

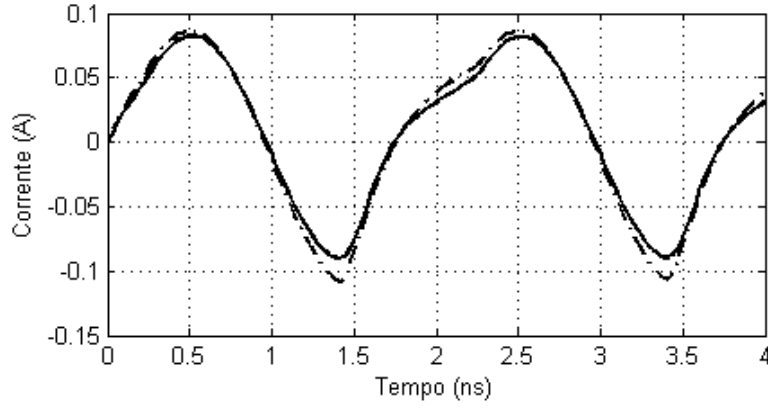


Figura 4.7: ---.(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 500MHz.

Na tabela 4.2 encontra-se os valores do simulador FEM referente ao passo de discretização no tempo e, no espaço, para cada frequência simulada. Todas as simulações foram realizadas em um processador core i5, de forma que através do profile viewer do Matlab, onde o simulador foi desenvolvido, apresentou um tempo médio para cada simulação de 23 segundos.

Tabela 4.2: Parâmetros de discretização

Frequência	$\Delta x (nm)$	$\Delta t (ns)$
50MHz	120	0,2
100MHz	120	0,1
500MHz	120	0,02

4.1.2 Junção PIN

Para simular o diodo PIN, foram usados os valores das constantes da tabela 4.1, porém com a concentração de dopantes $N_A = N_D = 10^{15} cm^{-3}$, conforme o gráfico do perfil de dopagem mostrado na figura 4.2. Para valores diferentes de elementos dopantes, como no caso da junção PN, a região intrínseca da junção PIN deveria ser muito maior que a considerada nas simulações, sendo necessário aumentar o domínio computacional. Fisicamente, considerar elementos dopantes iguais significa que a injeção de portadores dentro da região intrínseca é igual tanto para região P como para região N e, portanto, o efeito de aniquilação das cargas em alta frequência é mais fácil de ser observado.

Para cálculo da corrente de saturação no modelo SPICE, foi aplicada a equação (81). A capacitância de depleção, do modelo SPICE, foi calculada através do equivalente série entre as capacitâncias da região intrínseca e da junção PN. A capacitância da região PN foi calculada pela equação (80), enquanto que a capacitância da região intrínseca foi obtida pela equação,

$$C_i \approx \varepsilon \frac{A}{l_i} \quad (82)$$

onde, l_i é o comprimento da região intrínseca obtida da figura 4.8. Os valores da capacitâncias encontram-se na tabela 4.3.

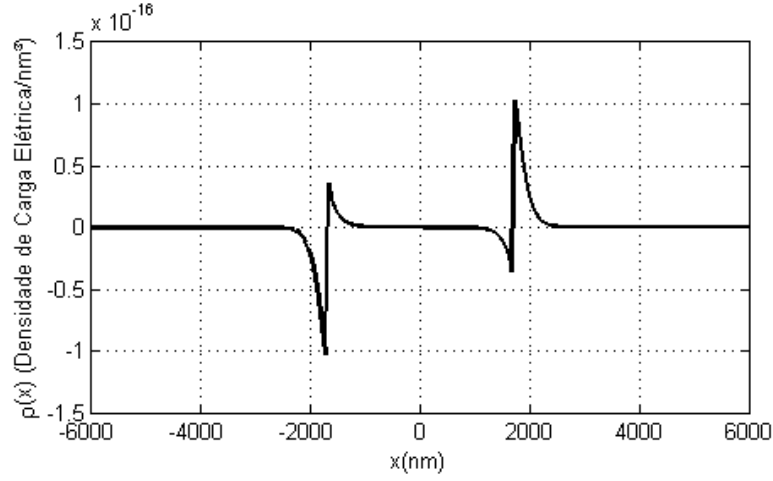


Figura 4.8: Distribuição da densidade de Carga da junção PIN com suas respectivas capacitâncias.

Tabela 4.3: Capacitâncias da junção PIN

C_{PM}	C_i	C_{PN}/C_i
$4,4pF$	$1,5pF$	$1,1pF$

O valor do tempo de transição, do modelo SPICE, $tt = 1,25ns$, foi estimado igualando as respostas do simulador FEM e do modelo SPICE para a menor frequência. Novamente foram utilizadas simulações para três frequências, como mostram os gráficos das figuras 4.9, figura 4.10 e, figura 4.11. Nestes resultados, para uma junção PIN, são enfatizadas as diferenças entre os modelos SPICE e o simulador FEM nas aplicações de baixas e altas frequências.

Em baixas frequências, figura 4.9, ambos os modelos diferenciam-se apenas por uma pequena variação no pico da corrente. Esta diferença é proveniente do simulador FEM, pois a região intrínseca impõe uma resistência que atenua a corrente na junção.

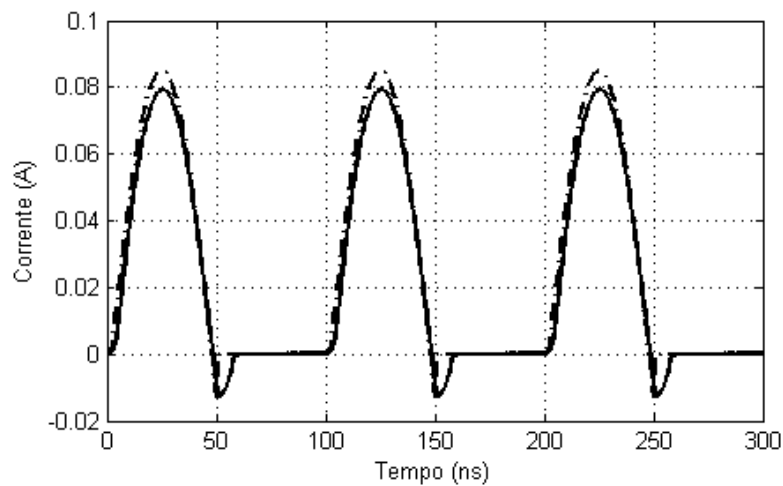


Figura 4.9: ---(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 10MHz.

Com o aumento da frequência, a recombinação de portadores é mais lenta que a injeção, e as cargas em excesso, provenientes das regiões P e N, ficam transitando por um tempo maior, e atenuam a corrente elétrica no momento em que os portadores positivos e negativos se recombinam. Estes resultados pode ser vistos nas figuras 4.10 e 4.11.

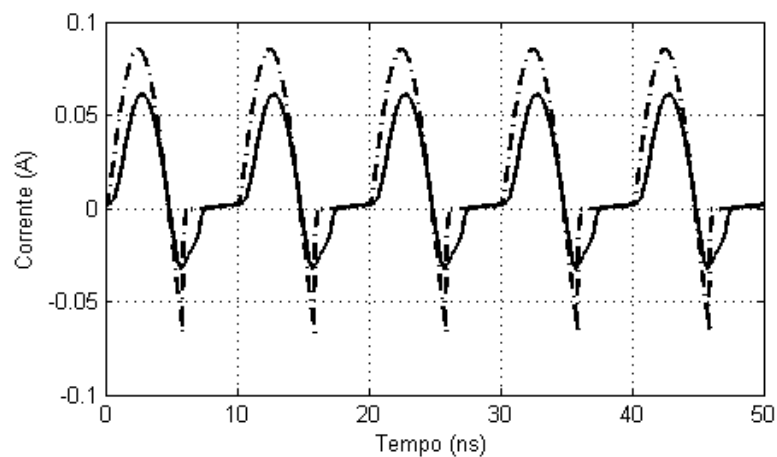


Figura 4.10: ---(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 100MHz.

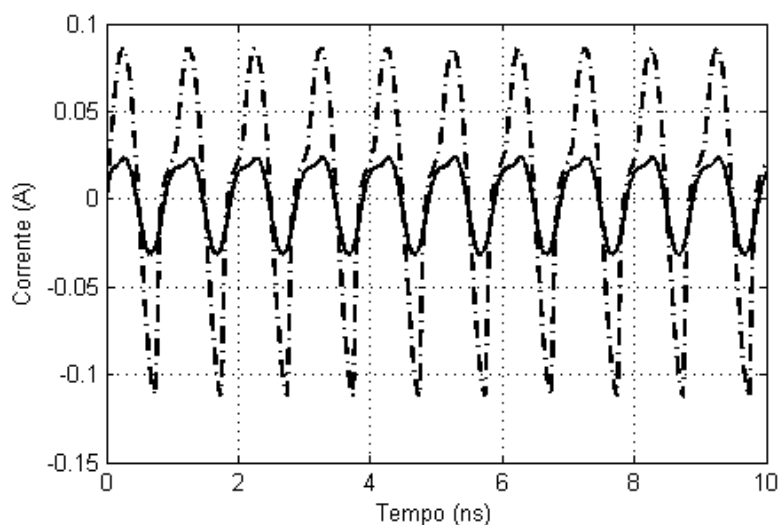


Figura 4.11: ---.(SPICE) -(modelo Proposto), frequência 1GHz.

Devido aos portadores de carga injetados na região intrínseca levarem um determinado tempo para se recombinarem, possibilita, por hipótese, concluir que a corrente elétrica não é atenuada instantaneamente. A não atenuação instantânea da corrente é devido a presença simultânea das componentes de baixa e alta frequência. Desta forma, uma quarta simulação foi realizada utilizando um pulso de chaveamento de tensão 2 volts de pico com transições abruptas, em série com uma fonte de tensão senoidal com 1 volt de pico e frequência de 1GHz. Observa-se que a junção PIN modelada pelo FEM contempla simultaneamente os comportamentos observados em baixas e altas frequências. Apenas a parcela de baixa frequência atua na polarização da junção, enquanto que a parcela de alta frequência soma-se à resposta do sinal senoidal de 1GHz. Os gráficos das figuras 4.12 e figura 4.13 mostram, respectivamente, o pulso de chaveamento aplicado, e a corrente elétrica através da junção.

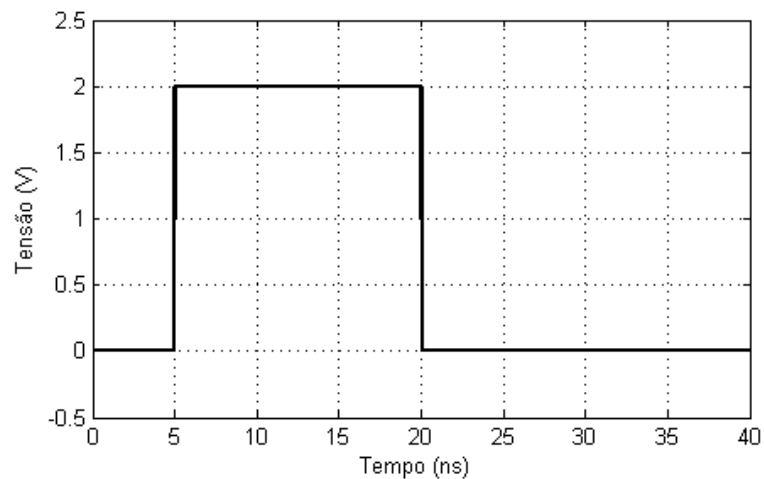


Figura 4.12: Pulso de chaveamento com transição abrupta.

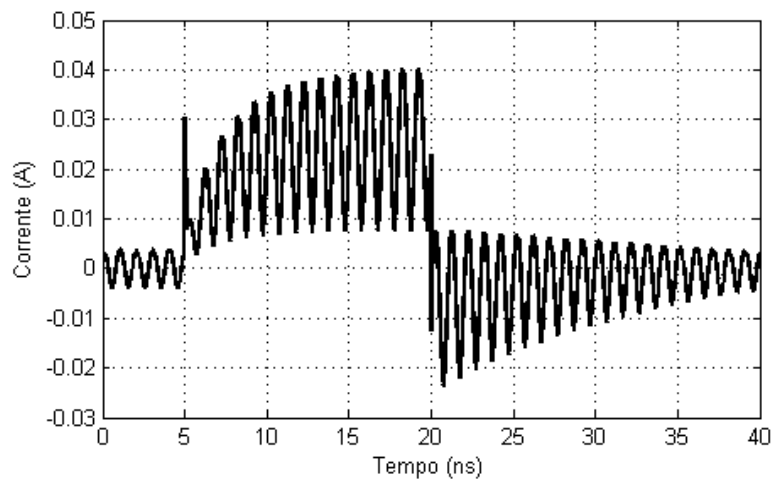


Figura 4.13: Comportamento simultâneo das componentes de baixa e alta frequência na corrente do circuito elétrico.

O mesmo procedimento foi realizado no modelo SPICE. A principal diferença no comportamento da junção PIN para ambos os modelos pode ser observada analisando o gráfico da figura 4.14. Na figura 4.14 está plotado a corrente elétrica para a junção PIN obtida através do modelo SPICE. Nota-se que, diferente do simulador FEM, o modelo SPICE apenas desloca o sinal para cima, não existindo a atuação simultânea das componentes de baixa para alta frequência. O único efeito de alta frequência é no instante em que a chave é desligada, ao qual a capacitância de difusão atua.

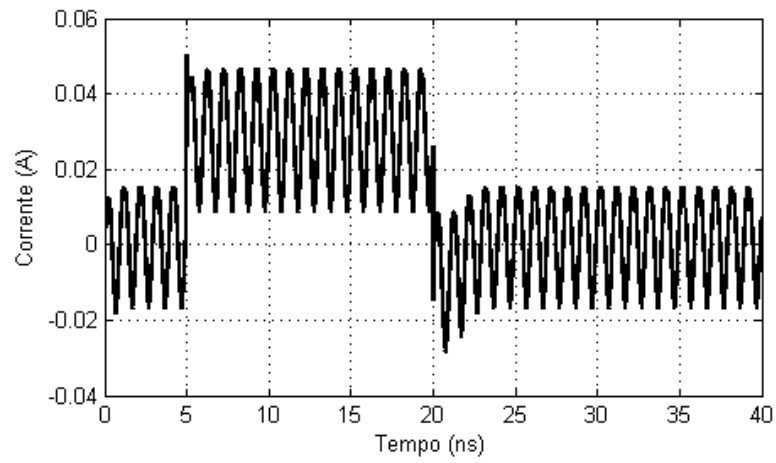


Figura 4.14: Resposta da corrente elétrica para junção PIN na frequência de 1GHz, sujeito ao pulso da figura 4.12.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES

A junção PN não apresentou diferenças significativas comparada com o modelo SPICE, o que significa que o modelo proposto é consistente. Para a junção PIN, observa-se através das simulações que quando modelada pelo FEM supera a dificuldade em modelar os efeitos simultâneos de baixa e alta frequência. O simulador FEM, quando imposto parâmetros físicos reais do silício, é numericamente estável. Desta forma, sendo o simulador FEM numericamente estável, futuramente, o objetivo é substituir o modelo SPICE do diodo pelo modelo FEM nas simulações eletromagnéticas que também usam o método dos elementos finitos para resolver as equações de onda. O modelo FEM também pode ser aplicado a diodos shottky apenas substituindo a região intrínseca da junção PIN por um material condutor.

O tempo de processamento do modelo FEM é maior quando comparado com o modelo SPICE. Porém, o tempo de simulação relatada no tópico 4.1.1 não é considerado lento quando comparado com a eficiência que o método dos elementos finitos emprega na solução de equações físicas complexas. Para junção PIN, para os efeitos simultâneos de baixa e alta frequência fossem observados, tempo de simulação foi de aproximadamente sete minutos. Apesar do código empregado no simulador FEM não estar otimizado, estes tempos de simulação não são considerados lentos, e podem ser melhorados drasticamente com a otimização do loop ao qual as equações do semiconductor são resolvidas.

A comparação dos resultados obtidos pelo simulador FEM com um dispositivo real não foi abordada devido a dificuldade em adquirir os parâmetros físicos reais do diodo. Desta forma, fica como trabalho futuro a elaboração de uma alternativa, através de um modelo numérico, ou de instrumentação eletrônica, que seja capaz de obter os parâmetros físicos de junções semicondutoras. Numericamente essa alternativa pode ser possível pela solução da equação do transporte de Boltzmann.

O modelo proposto nesta dissertação não considera os efeitos de ruptura, mas, a forma com que a equação da recombinação foi modelada, facilita sua inclusão em modelos mais complexos que consideram os efeitos térmicos e de ruptura. Futuramente, gradientes de temperatura podem ser considerados nas equações da continuidade, entrando como uma variável constante nas matrizes do método de Newton-Raphson; análogo como foi feito para o perfil de dopagem hiperbólico. Os parâmetros de mobilidade, para gradientes de temperatura nas equações do transporte difusivo, devem ser considerados como funções dependentes do potencial elétrico. Para variações no tempo da temperatura, deve ser requisitado modelos mais complexos como a própria equação da continuidade de Boltzmann.

BIBLIOGRAFIA

- [1] LIOU, J. Semiconductor device physics and modelling. 1. overview of fundamental theories and equations. *Circuits, Devices and Systems, IEE Proceedings G*, v. 139, n. 6, p. 646 –654, dec 1992. ISSN 0956-3768.
- [2] F. B.R.. DE SOUZA, W. A. A. J. D.; BONFIM, M. J. C. A pin diod model for finite-element-time-domaine simulations. *Journal of microwaves, Optoeletronics ans Eletromagnetic Applications*, v. 8, p. 38–48, 2009.
- [3] HALL, R. Recombination processes in semiconductors. *Proceedings of the IEE - Part B: Electronic and Communication Engineering*, v. 106, n. 17, p. 923 –931, may 1959. ISSN 0369-8890.
- [4] SAH, C.-T.; NOYCE, R.; SHOCKLEY, W. Carrier generation and recombination in p-n junctions and p-n junction characteristics. *Proceedings of the IRE*, v. 45, n. 9, p. 1228 –1243, sept. 1957. ISSN 0096-8390.
- [5] GUREVICH, Y.; VELAZQUEZ-PEREZ, J. Transport of non-equilibrium charge carriers in bipolar semiconductor materials. p. 317 –320, 0-0 2006.
- [6] LIOU, J. Semiconductor device physics and modelling. 2. overview of models and their applications. *Circuits, Devices and Systems, IEE Proceedings G*, v. 139, n. 6, p. 655 –660, dec 1992. ISSN 0956-3768.
- [7] VOLOVICHEV, I. N. et al. Recombination and lifetimes of charge carriers in semiconductors. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 95, n. 8, p. 4494–4496, 2004. Disponível em: <<http://link.aip.org/link/?JAP/95/4494/1>>.
- [8] ERNST, T. et al. Recombination current modeling and carrier lifetime extraction in dual-gate fully-depleted soi devices. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, v. 46, n. 7, p. 1503 –1509, jul 1999. ISSN 0018-9383.

- [9] PULFREY, D.; DENIS, A. S.; VAIDYANATHAN, M. Compact modeling of high-frequency, small-dimension bipolar transistors. p. 81 –85, 1998.
- [10] HURKX, G.; KLAASSEN, D.; KNUVERS, M. A new recombination model for device simulation including tunneling. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, v. 39, n. 2, p. 331 –338, feb 1992. ISSN 0018-9383.
- [11] GUREVICH, Y. et al. General approach to study thermo-e.m.f. generated by nonequilibrium carriers in bipolar semiconductors. p. 314 – 316, aug. 2002.
- [12] KO, W. The reverse transient behavior of semiconductor junction diodes. *Electron Devices, IRE Transactions on*, v. 8, n. 2, p. 123 –131, march 1961. ISSN 0096-2430.
- [13] BEYNE, W. T.; SCHUTT-AINé, J. E. Accurate diode forward and reverse recovery model using asymptotic waveform evaluation techniques. *IEEE*.
- [14] LIANG, Y.-C.; GOSBELL, V. J. Diode forward and reverse recovery model for power electronics spice simulations. *IEEE Transactions on Power Electronics*, v. 5, p. 346–356, 1990.
- [15] GAMAL, H. M. S. H.; CHANTE, J. Carrier lifetime measurement by ramp recovery of p-i-n diodes. *IEEE transactions on electron devices*, v. 37, p. 4, 1990.
- [16] KRAUS, R.; MATTAUSCH, H. Status and trends of power semiconductor device models for circuit simulation. *Power Electronics, IEEE Transactions on*, v. 13, n. 3, p. 452 –465, may 1998. ISSN 0885-8993.
- [17] BANK, R.; ROSE, D.; FICHTNER, W. Numerical methods for semiconductor device simulation. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, v. 30, n. 9, p. 1031 – 1041, sep 1983. ISSN 0018-9383.
- [18] MOREL, S. H. G. H.; CHANTE, J. P. State variable modeling of the power pin diode using an explicit approximation of semiconductor device equations: A novel approach. *IEEE transactions on power electronics*, v. 9, p. 112–120, 1994.

- [19] CHEN, Z. Finite element analysis of the one-dimensional full drift-diffusion semiconductor model. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 32, n. 2, p. pp. 455–483, 1995. ISSN 00361429. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2158406>>.
- [20] RINGHOFER, C.; SCHMEISER, C. An approximate newton method for the solution of the basic semiconductor device equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 26, n. 3, p. pp. 507–516, 1989. ISSN 00361429. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2157668>>.

APÊNDICE A

A distribuição de Fermi-Dirac é uma equação de caráter estatístico, que tem por finalidade encontrar a mais provável banda de energia que terá a maior concentração de portadores de carga ocupando seus estado eletrônicos. Para encontrar a distribuição, os portadores de carga dentro de um material são considerados como partículas indistinguíveis umas das outras e, que obedecem o princípio de Pauli. A distribuição de portadores pode ser alterada com a presença de energia externa, como por exemplo, a temperatura, mas desde que a conservação da energia e de cargas seja mantida.

A quantidade de bandas de energia e, a quantidade de estados eletrônicos aptos para receberem as partículas, são grandezas constantes. A única variável é a quantidade de partículas presente no material, que pode ser alterada com a presença de fonte de energia. Considerando, a priori, a temperatura ambiente como a fonte de energia; todos os portadores de carga terão energia suficiente para transitar pela estrutura e ocupar estados eletrônicos de qualquer banda de energia, desde que a energia desta banda não seja maior que a própria energia do portador de carga elétrica. Logo, pode-se concluir que ainda existirão estados eletrônicos, em bandas de maior energia, que ainda estão desocupados. Supondo agora que, juntamente com a energia proveniente da temperatura, seja acoplada uma fonte externa que forneça mais portadores dos que estão presentes no material. Como a energia e a distribuição de portadores são conservados, a tendência do material é buscar novamente o equilíbrio, logo, pode-se citar como exemplo que, se cinco partículas são injetados no material, outras cinco devem ser retiradas.

Como base nestas definições, para caracterizar a distribuição de Fermi, defini-se duas equações,

$$\sum N_i = c_1 \quad (\text{A.1})$$

$$\sum E_i N_i = c_2, \quad (\text{A.2})$$

onde N_i é quantidade de portadores em uma banda de energia e, c_1 , c_2 são constantes. A equação (A.1) descreve que a soma de todas as partículas dentro da estrutura deve

ser constante (conservada). De forma similar, a equação (A.2), descreve que a energia total do material também é constante (conservada). Logo, prevalecendo a conservação da energia, as derivadas das equações (A.1) e (A.2) em relação a N_i , devem ser iguais a zero, ou seja,

$$\frac{d}{dN_i} (\sum N_i) = \sum \delta N_i = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{d}{dN_i} (\sum E_i N_i) = \sum E_i \delta N_i = 0 \quad (\text{A.4})$$

onde, δN_i é o total de partículas conservadas dentro do material.

Para encontrar a distribuição de Fermi-Dirac, falta agora encontrar a maior distribuição possível de partículas em que o material se comporte como um sistema conservado. Definindo S_i como a quantidade de estados eletrônicos dentro de uma banda de energia, a maior distribuição para esta banda de energia, definida como $f(N_i)$, é dado por,

$$f(N_i) = \frac{S_i}{N_i!(S_i - N_i)!}. \quad (\text{A.5})$$

Para todas as bandas de energia existentes, a maior distribuição, definida como $f(\overline{N})$, é o produtório da equação (A.5). De forma simplória, $f(\overline{N})$ descreve quantas vezes mais as partículas podem ser arranjadas em todo material, logo,

$$f(\overline{N}) = \frac{S_0}{N_0!(S_0 - N_0)!} \times \frac{S_1}{N_1!(S_1 - N_1)!} \times \dots \times \frac{S_i}{N_i!(S_i - N_i)!} \quad (\text{A.6})$$

$$f(\overline{N}) = \prod \frac{S_i}{N_i!(S_i - N_i)!}. \quad (\text{A.7})$$

A maior distribuição possível é o ponto de máximo da equação (A.7), ou seja, a derivada de (A.7) em relação a N_i deve ser nulo,

$$\frac{d}{dN} (f(\overline{N})) = \frac{d}{dN_i} \left(\prod \frac{S_i}{N_i!(S_i - N_i)!} \right) = 0. \quad (\text{A.8})$$

Aplicando o logarítmo neperiano em ambos os lado da equação (A.7), chega-se à,

$$\ln(f(\overline{N})) = \sum \{ \ln(S_i!) - \ln(N_i!) - \ln[(S_i - N_i)!] \}. \quad (\text{A.9})$$

Para eliminar o fatoriais nos logarítmos, aplica-se a aproximação de Stirling's, descrita por,

$$\ln(x!) = x \ln(x) - x \quad (\text{A.10})$$

de forma que a equação (A.9) fica,

$$\ln(f(\bar{N})) = \sum \{S_i \ln(S_i) - S_i - N_i \ln(N_i) + N_i - (S_i - N_i) \ln[(S_i - N_i)] + (S_i - N_i)\} \quad (\text{A.11})$$

que facilmente chega-se a,

$$\ln(f(\bar{N})) = \sum \{S_i \ln(S_i) - N_i \ln(N_i) - (S_i - N_i) \ln[(S_i - N_i)]\}. \quad (\text{A.12})$$

Através da relação (A.8), o lado direito da equação (A.12) pode ser derivado em relação a N_i , obtendo como resultado,

$$\sum [-\delta N_i \ln(N_i) + \delta N_i \ln(S_i - N_i)] = \sum \delta N_i \left[\left(\frac{S_i - N_i}{N_i} \right) \right] = 0. \quad (\text{A.13})$$

O próximo passo é somar a maior distribuição de portadores com as restrições impostas pelas equações (A.3) e (A.4) através do método dos multiplicadores de Lagrange,

$$\sum \left\{ -\delta N_i \left[\left(\frac{S_i - N_i}{N_i} \right) \right] + \alpha \delta N_i + \beta E_i \delta N_i \right\} = 0 \quad (\text{A.14})$$

onde α e, β , são os multiplicadores de Lagrange, dados por relações entre a energia de Fermi E_f e, a energia térmica que envolve a constante de Boltzmann k_B e a temperatura T , conforme,

$$\alpha = -\frac{E_f}{k_B T} \quad (\text{A.15})$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (\text{A.16})$$

Deixando δN_i em evidência,

$$\sum \left\{ -\left[\left(\frac{S_i - N_i}{N_i} \right) \right] + \alpha + \beta E_i \right\} \delta N_i = 0 \quad (\text{A.17})$$

a igualdade pode ser satisfeita igualando somente os termos dentro dos colchetes a zero,

$$\left\{ -\left[\left(\frac{S_i - N_i}{N_i} \right) \right] + \alpha + \beta E_i \right\} = 0. \quad (\text{A.18})$$

Através da equação (A.18), deseja-se isolar a razão $\frac{N_i}{S_i}$, que é descrita como a quantidade de portadores por estados eletrônicos dentro de um material semiconductor, ou condutor. Logo, isolando $\frac{N_i}{S_i}$, o resultado é a distribuição de Fermi-Dirac,

$$\frac{N_i}{S_i} = \frac{1}{1+e^{\alpha+\beta E_i}} \quad (\text{A.19})$$

onde $\frac{N_i}{S_i} = f(E_i)$. Substituindo as relações (A.15) e (A.16) em (A.19) obtém-se,

$$f(E_i) = \frac{1}{1+e^{\left(\frac{E_f-E_i}{k_B T}\right)}}. \quad (\text{A.20})$$

A distribuição de Fermi-Dirac $f(E_i)$, representa a probabilidade de ocupação de um estado com energia E_i por um portador de carga. Para calcular o número de portadores numa faixa de energia, é preciso saber também o número de estados eletrônicos nesta faixa. Este número é dado pela densidade de estados, definida por $D(E)$, que depende dos níveis de energia obtidos da solução da equação de Schroedinger. Desta forma, a probabilidade de ocupação de um estado vezes a densidade de estados existentes ao longo de uma banda de energia, fornece a quantidade total de portadores, que é dado por,

$$n_0 = \int D(E) f(E) dE \quad (\text{A.21})$$

$$p_0 = \int D(E) f(E) dE. \quad (\text{A.22})$$

O resultado destas integrais, são as equações (1) e (2) do capítulo 2 no tópico 2.1.1.

A grande contribuição da estatística de Fermi-Dirac, para a física do estado sólido, é a capacidade de determinar qual é a mínima energia necessária para que os portadores de carga entrem em movimento dentro do material. Caso a energia fornecida pela fonte externa seja menor que a energia de Fermi, os portadores não terão energia cinética suficiente para trafegar entre os estados eletrônicos permitidos nas bandas de energia. O limite de aplicação da estatística de Fermi-Dirac é o momento em que a temperatura do material começa a variar com o tempo, onde a ferramenta matemática usada para este caso é a equação da continuidade de Boltzmann.

APÊNDICE B

A equação do transporte de Boltzmann é considerada a equação mais fundamental que descreve a física dos semicondutores. A ideia central em aplicar a equação de Boltzmann está em tratar os portadores de cargas como partículas semi-clássicas, ou seja: o elétron, como uma onda possui, uma frequência e, um comprimento de onda λ que, ainda satisfazem as leis de Newton,

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = q \vec{E} \quad (\text{B.1})$$

onde \vec{p} , q e \vec{E} , são respectivamente o momento, a carga elétrica e o campo elétrico. O momentum do elétron pode expresso como,

$$\vec{p} = \frac{h}{2\pi} \vec{k} \quad (\text{B.2})$$

onde \vec{k} é o vetor de onda.

Um elétron em um semicondutor, que está sujeito as condições mencionadas acima, movimenta-se pelo material com a possibilidade de ocupar estados que estão livres em uma determinada banda de energia. Desta forma, é conveniente definir para um elétron, em uma determinada posição, com um determinado momento e, em um determinado tempo, a probabilidade de ocupar um estado livre em uma determinada banda de energia por,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0. \quad (\text{B.3})$$

Este resultado implica que a probabilidade de um estado ocupado por um elétron é constante, ou seja, igual para todos os estados. Supondo que a trajetória do elétron é em uma direção (direção x), pela regra da cadeia obtém-se a equação diferencial do transporte de Boltzmann,

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_x} \frac{dp_x}{dt}. \quad (\text{B.4})$$

Generalizando, a equação (A.4) pode ser expressa em função da força \vec{F} e da velocidade \vec{v} para todas as direções,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \nabla f + \vec{F} \nabla_p f = 0, \quad (\text{B.5})$$

onde \vec{v} e \vec{F} , são respectivamente, a velocidade e a força da partícula. Durante a trajetória do elétron, devido a imperfeições no material semiconductor e, injeção de portadores, existe a possibilidade da posição e o momentum do elétron ser alterado; caracterizando uma geração ou uma recombinação. Para considerar os efeitos de geração e recombinação no estado de energia, a equação (A.5) é reescrita como,

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial t} + \vec{v} \nabla f + \vec{F} \nabla_p f = \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial t} \big|_{R,r}. \quad (\text{B.6})$$

A equação (A.6) é a forma completa da equação continuidade de Boltzmann.

Na realidade, a equação (A.6) descreve a probabilidade de ocupação dos estados em uma banda de energia para um elétron. Porém, o problema é muito mais complicado que este devido a grande quantidade de partículas em um semiconductor, cujo as interações entre as partículas alteram a probabilidade de um determinado estado ser ocupado. A maneira de contornar esta dificuldade reside em considerar as interações entre as partículas através densidade de carga elétrica, onde o resultado é um potencial eletrostático consistente obtido pela solução da equação de Poisson.